

32/uub(65) 2^e ex.

BIBLIOTHEEK
STARINGGEBOUW

Het gebruik van onzekerheidsanalyse bij modelberekeningen

Een toepassing op het regionale bodemverzuringsmodel RESAM

J. Kros
P.H.M. Janssen
W. de Vries
C.I. Bak

Rapport 65

STARING CENTRUM, Wageningen, 1990



CENTRALE LANDBOUWCATALOGUS

0000 0386 3269

17 JUL 1990

18u 521751*

REFERAAT

Kros, J., P.H.M. Janssen, W. de Vries en C.I. Bak, 1990. Het gebruik van onzekerheidsanalyse bij modelberekeningen; een toepassing op het regionale bodemverzuringmodel RESAM. Staring Centrum. Rapport 65
127 blz.; 21 fig.; 23 tab.; 62 ref.

Met behulp van Monte Carlo-simulatietechnieken, regressie- en correlatieanalyse is de onzekerheid in modeluitkomsten van RESAM, alsmede de bijdrage van onzekerheidsbronnen (modelinputs, parameters en variabelen) hieraan, gekwantificeerd voor de jaargemiddelde pH, NO₃-concentratie, NH₄/K-molratio en Al/Ca-molratio in de wortelzone van een Douglasbos op een holtpodzolgrond. Beide aspecten blijken af te hangen van de modeluitgang, de beschouwde bodemlaag en het beschouwde tijdstip. In het algemeen blijkt de onzekerheid in pH en NO₃-concentratie gering en in NH₄/K- en Al/Ca-molratio groot, en leveren parameters en variabelen die nitrificatie en Al-verwerking bepalen, een belangrijke bijdrage aan de onzekerheid in de beschouwde modeluitgangen.

Trefwoorden: onzekerheid, latin hypercube sampling, Monte Carlo-analyse, regressie-analyse, correlatie-analyse
model, bodemverzuring

ISSN 0924-3070

©1990

STARING CENTRUM Instituut voor Onderzoek van het Landelijk Gebied
Postbus 125, 6700 AC Wageningen
Tel.: 08370-19100; telefax: 08370-24812; telex: 75230 VISI-NL

Het Staring Centrum is een voortzetting van: het Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding (ICW), het Instituut voor Onderzoek van Bestrijdingsmiddelen, afd. Milieu (IOB), de Afd. Landschapsbouw van het Rijksinstituut voor Onderzoek in de Bos- en Landschapsbouw "De Dorschkamp" (LB), en de Stichting voor Bodemkartering (STIBOKA).

Het Staring Centrum aanvaardt geen aansprakelijkheid voor eventuele schade voortvloeiend uit het gebruik van de resultaten van dit onderzoek of de toepassing van de adviezen.

Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotokopie, microfilm en op welke andere wijze ook zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van het Staring Centrum.

Project nr. 7113

INHOUD	Blz.
WOORD VOORAF	11
SAMENVATTING	13
1 INLEIDING	17
1.1 Onzekerheid in modelvoorspellingen	17
1.2 Probleemstelling	18
1.3 Doelstelling	19
1.4 Indeling van het rapport	20
2 METHODOLOGIE VAN ONZEKERHEIDSANALYSE	21
2.1 Aanpak	21
2.2 De gebruikte methode	26
2.2.1 Inleiding	26
2.2.2 Het programma PRISM	27
2.3 Analyse van de onzekerheidsbronnen	29
2.3.1 Correlatie-analyse	29
2.3.2 Regressie-analyse	34
2.3.3 Niet parametrische statistische methoden	41
2.3.4 Keuze van de analysetechniek	42
3 HET MODEL RESAM	47
3.1 Modelstructuur	47
3.2 Modelinitialisatie	49
4 INVENTARISATIE EN KWANTIFICERING VAN ONZEKERHEIDSBRONNEN	51
4.1 Afbakening van de studie	51
4.2 Dataspecificatie	52
4.2.1 Inleiding	52
4.2.2 Kansverdeling van modelinputs	56
4.2.3 Kansverdeling van variabelen	61

4.2.3.1	Boomcompartimenten	61
4.2.3.2	Bodemcompartimenten	63
4.2.4	Kansverdeling van parameters	66
4.2.4.1	Boomcompartimenten	66
4.2.4.2	Bodemcompartimenten	69
4.2.5	Correlaties	71
5	RESULTATEN EN DISCUSSIE	75
5.1	Onzekerheid in modeluitkomsten	75
5.1.1	pH	77
5.1.2	Nitraatconcentratie	80
5.1.3	Ammonium/kalium-molratio	85
5.1.4	Aluminium/calcium-molratio	89
5.2	Bijdrage van de onzekerheidsbronnen	94
5.2.1	Gebruikte onzekerheidsmaat	94
5.2.2	Analyse van de onzekerheidsbronnen	98
5.2.2.1	pH	98
5.2.2.2	Nitraatconcentratie	102
5.2.2.3	Ammonium/kalium-molratio	106
5.2.2.4	Aluminium/calcium-molratio	110
5.2.3	Conclusies	114
6	CONCLUSIES EN SLOTOPMERKINGEN	117
7	LITERATUUR	121

FIGUREN

1	Structuur van PRISM pakket voor het uitvoeren van onzekerheidsanalyses	28
2	Voorbeelden van scatterplots met de bijbehorende waarden van de correlatie-coëfficiënt	31
3	Voorbeelden van scatterplots met de bijbehorende waarden van de rangcorrelatie-coëfficiënt	33
4	Onzekerheid in de naaldvalflux bij de veronderstelde ranges en correlatie tussen naaldval constante en naaldmassa	73

5	Verloop van de pH in de tijd in laag 1 en 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run	77
6	Histogrammen van de pH in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode	80
7	Verloop van de NO_3 -concentratie in de tijd in laag 1 en 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run	81
8	Histogrammen van de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode	84
9	Verloop van de NH_4/K -molratio in de tijd in laag 1 en 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run	85
10	Histogrammen van de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode	87
11	Histogrammen van de gemiddelde NH_4/K -molratio's in laag 1 en 3, afkomstig uit veldonderzoek tezamen met de modeluitkomsten voor 1987	88
12	Verloop van de Al/Ca -molratio in de tijd in laag 1 en 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en referentie-run	89
13	Histogrammen van de Al/Ca -molratio in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode	92
14	Histogrammen van de gemiddelde Al/Ca -molratio's in laag 1 en laag 3, afkomstig uit veldonderzoek in 1987 tezamen met de modeluitkomsten voor 1987	93
15	Verloop van de COD voor de pH, de NO_3 -concentratie, en de Al/Ca - en NH_4/K -molratio in laag 1 en 3	95
16	Verloop van de RCOD voor de rang-getransformeerde NH_4/K -molratio in de tijd in laag 3	96
17	Scatterplots voor de NH_4/K -molratio in 1987 en 2010	97
18	Verloop van de RTU in de tijd tussen modelparameters en de pH in laag 1 en 3	101

19	Verloop van de SRC in de tijd tussen modelparameters en de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3	105
20	Verloop van de SRC in de tijd tussen modelparameters en de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3	109
21	Verloop van de SRRC in de tijd tussen modelparameters en de Al/Ca -molratio in resp. laag 1 en 3	113

TABELLEN

1	Maten voor de invloed van de onzekerheidsbronnen op de onzekerheid in modeluitkomsten	42
2	Overzicht van de procesbeschrijvingen in RESAM in relatie tot de beschouwde stoffen	48
3	Waarden van variabelen en parameters die niet zijn gevarieerd voor het bodemcompartiment	55
4	Kansverdeling van de natte depositie van SO_4 , NO_3 , NH_4 , Ca, Mg, K, Na en Cl	57
5	Kansverdeling van de droge depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 en de droge depositiefraction (f_{dd})	58
6	Gebruikte waarden voor gemiddelde totale depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 in 1987, 2000 en 2010 in Nederland	60
7	Gebruikte reductiefractionen voor SO_2 , NO_x en NH_3 in de periode tussen 1987 en 2010	61
8	Kansverdeling van variabelen voor de boomcompartimenten	62
9	Kansverdeling van variabelen voor de bodemcompartimenten	64
10	Waarden voor a_0 en a_1 in de vertaalfunctie tussen laagdichtheid en organische-stofgehalten	65
11	Kansverdeling van de laagdichtheid, SSC en CEC in de minerale lagen van een holtpodzolgrond	67
12	Kansverdeling van parameters voor de boomcompartimenten	67
13	Kansverdeling van parameters voor de bodemcompartimenten	70
14	Ingebrachte correlaties	71

15	Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de pH in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010	79
16	Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010	83
17	Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010	86
18	Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de Al/Ca -molratio in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010	90
19	Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de pH in laag 1 en laag 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010	99
20	Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010	103
21	Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010	107
22	Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de Al/Ca -molratio in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010	111
23	De belangrijkste onzekerheidsbronnen voor de pH, NO_3 -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca -molratio in laag 1 en 3 aan het begin (1987) en eind (2010) van de simulatie-periode	115

WOORD VOORAF

In het kader van het Nationaal Programma Zure Regen is in opdracht van de Stuurgroep Verzuuringsonderzoek een regionaal bodemverzuuringsmodel (RESAM) ontwikkeld bij de voormalige Stichting voor Bodemkartering, vanaf 1-1-1989 opgenomen in het Staring Centrum. Doel van RESAM is op nationale schaal de lange termijn effecten te voorspellen van atmosferische depositie op de bodem. RESAM vormt daarbij een onderdeel van het zogenaamde DAS (Dutch Acidification Simulation) model waarmee de gehele keten van verzurende emissies tot en met de effecten op het milieu en de schade wordt beschreven.

Ten einde meer inzicht te verkrijgen in de onzekerheid van voorspelde effecten van bepaalde depositiescenario's is een zogenaamde onzekerheidsanalyse uitgevoerd op het model RESAM. Daarbij is gekeken naar de onzekerheid in modeluitvoer als gevolg van onzekerheden in modelparameters en modelvariabelen. Deze studie is tot stand gekomen op basis van een intensieve samenwerking tussen het Staring Centrum (Kros, de Vries) en het RIVM (Janssen, Bak).

Bij de onzekerheidsanalyse is gebruik gemaakt van het programma-pakket PRISM dat ontwikkeld is door Dr. R.H. Gardner (Oak Ridge National Laboratory) en door Dr. J.P. Hettelingh (IIASA, Laxenburg, thans RIVM). Dit pakket genereert o.a. aselecte combinaties van variabelen (beginsituaties) en parameters uit vooraf opgegeven verdelingen waarmee vervolgens RESAM is gerund.

De auteurs dank verschuldigd aan Dr. R.H. Gardner en Dr. J.P. Hettelingh voor het beschikbaar stellen van PRISM en de verstrekte informatie over het gebruik ervan. Verder danken de auteurs Dr. W. Slob voor adviezen met betrekking tot het programmapakket GENSTAT dat is toegepast bij de statistische

analyse van de modeluitvoer van RESAM, J.C. Voogd voor de statistische bewerking van data-invoer en mw. L.C. van Liere voor de tekstverwerking.

SAMENVATTING

In dit rapport wordt verslag gedaan van een onzekerheidsanalyse op het bodemverzuringmodel RESAM. RESAM is ontwikkeld met als doel op nationale schaal het lange termijn effect van atmosferische depositie op de bodem(vocht)samenstelling te voorspellen. Het berekent o.a. de jaarlijkse, waterflux gemiddelde, concentraties van de belangrijkste kat- en anionen in het bodemvocht, de kationen bezetting aan het adsorptiecomplex en de Al-voorraad in hydroxiden. RESAM vormt een belangrijk onderdeel van het Dutch Acidification Simulation (DAS)-model dat is opgebouwd uit diverse deelmodellen, die tezamen een kwantitatieve beschrijving proberen te geven van emissie-effect relaties.

Het doel van de studie is het verder ontwikkelen van een algemene methodiek voor onzekerheidsanalyse en het toepassen hiervan ten-einde inzicht te krijgen in de onzekerheid van relevante model-uitkomsten en de bijdrage van diverse modelinputs (atmosferische depositie), modelparameters en variabelen hieraan. Nadruk is daarbij gelegd op de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de onzekerheid in modeluitkomsten in het kader van de dataverzameling voor regionale toepassing.

Deze studie is beperkt tot de effecten van onzekerheden in diverse modelinputs, modelparameters en modelvariabelen. Onzekerheden als gevolg van de gekozen procesformuleringen (modelstructuur) en de implementatie en numerieke oplossing hiervan (modeloperatie), zijn op dit moment niet in beschouwing genomen. De onzekerheidsanalyse is uitgevoerd met behulp van Monte Carlo-simulaties. Hierbij is verondersteld dat de onzekerheid in de diverse modelinputs, modelparameters en variabelen (onzekerheidsbronnen) gekarakteriseerd kan worden in de vorm van kansverdelingen. Vervolgens zijn verschillende trekkingen uit deze verdelingen verricht en zijn voor elke serie getrokken waarden,

de bijbehorende modeluitkomsten via model-simulaties berekend. Uit de resultaten is de kansverdeling (het gemiddelde, de variantie, percentielwaarden enz.) van de modeluitkomsten geschat. De invloed van de (afzonderlijke) onzekerheidsbronnen aan de modeluitkomsten is geanalyseerd met behulp van lineaire regressie-analyse, waarbij de relatie tussen de modeluitkomsten en de diverse onzekerheidsbronnen benaderd wordt door een lineaire regressie-model.

Om te voorkomen dat het aantal model-simulaties (en daarmee de rekentijd) onacceptabel hoog zou worden, is gebruik gemaakt van een gestratificeerde trekkingsmethode: Latin Hypercube Sampling (LHS). Hiervoor is gebruik gemaakt van een aangepaste versie van het programma-pakket PRISM. PRISM maakt gebruik van LHS en biedt tevens de mogelijkheid om de eventuele correlaties tussen de diverse onzekerheidsbronnen mee te nemen.

De onzekerheidsanalyse heeft betrekking op de pH, NO_3^- -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca -molratio in de wortelzone van een holtpodzolbodem begroeid met Douglas. De simulatie omvat de periode 1987-2010. Het depositiescenario van SO_2 , NO_x en NH_3 is gebaseerd op depositiedoelstelling van $2400 \text{ mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ en $1400 \text{ mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ potentieel zuur in resp. 2000 en 2010.

Om het aantal te bestuderen modelparameters en daarmee het aantal Monte Carlo-simulaties te beperken, is gekozen voor een stationaire nutriëntencyclus. Verder zijn die parameters en variabelen buiten beschouwing gelaten waarvan op voorhoud het effect op de geselecteerde modeluitvoer (pH, NO_3^- -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca -molratio) verwaarloosbaar is te achten. Tenslotte is er geen rekening gehouden met de onzekerheid in het depositiescenario, waarmee de beoogde reductie in depositie wordt beschreven. Uiteindelijk zijn er ca. 75 modelinputs, parameters en variabelen onderzocht. Hiervan zijn op basis van veld- en laboratoriumonderzoek, gegevens uit het bodemkundig informatie-systeem van het Staring Centrum, literatuur en calibratie de

verdelingen gekarakteriseerd middels het gemiddelde, standaarddeviatie, minimum en maximum en vorm van de kansverdeling. Verder is tussen enkele onzekerheidsbronnen een correlatie verondersteld.

Uit deze studie kan het volgende geconcludeerd worden:

1. De onzekerheid in modeluitkomsten hangt sterk af van de modeluitgang en het beschouwde bodemcompartiment en is:
 - relatief groot voor de NH_4/K -molratio, de Al/Ca -molratio;
 - relatief klein voor de pH en NO_3 -concentratie;
 - groter in de ondergrond dan in de bovengrond.
2. De bijdrage van onzekerheidsbronnen aan modeluitkomsten hangt af van de modeluitgang, de beschouwde bodemlaag en het beschouwde tijdstip. Algemeen geldt dat de inputs parameters en variabelen die de dynamiek van N (N-depositie, N-gehaltes in naalden en nitrificatie constante) en Al (hoeveelheid Al-hydroxide en evenwichtsconstante) bepalen binnen de beschouwde termijn (tot 2010) een belangrijke rol spelen bij de beschouwde modeluitgangen.
3. Voor het verkrijgen van gebiedsgemiddelde waarde, bij een later uit te voeren regionale toepassing op nationale schaal, lijkt het gebruik van gebiedsgemiddelde parameterwaarden gerechtvaardigd.

1 INLEIDING

1.1 Onzekerheid in modelvoorspellingen

Bij veel milieu-onderzoek worden we geconfronteerd met aspecten die belangrijke consequenties hebben voor de ontwikkeling en het gebruik van wiskundige modellen hierbij. Milieu-onderzoek kenmerkt zich namelijk vaak door:

- grote complexiteit van de beschouwde problemen;
- natuurlijke variabiliteit van de betrokken processen;
- onzekerheid over en onvolledige kennis van de achterliggende mechanismen;
- onnauwkeurigheid en onvoldoende beschikbaarheid van metingen.

Daarom kunnen wiskundige modellen slechts een benaderende beschrijving van de werkelijkheid geven. Bij de modelontwikkeling is het daarom van groot belang om vast te leggen wat we willen benaderen en hoe we dat doen. Uiteraard dienen we ons hierbij te laten leiden door de beoogde toepassing.

Bovendien zullen we, alvorens we het model verantwoord kunnen toepassen, een indruk moeten krijgen van de betrouwbaarheid van het model. Met name hoort daarbij het kwantificeren van de onzekerheden. Het is immers een hachelijke zaak om conclusies te trekken uit modelresultaten als daarbij geen rekening wordt gehouden met de aannamen en onzekerheden die inherent zijn aan het modelleringsproces.

Een onzekerheidsanalyse, dat wil zeggen een studie naar de onzekere aspecten van een model en naar hun invloed op de modeluitkomsten, zal in veel gevallen een essentieel onderdeel moeten vormen van modelonderzoek. Zo'n analyse verduidelijkt niet alleen de rol van de onzekerheden, maar kan ook bijdragen tot meer inzicht en vertrouwen in het model. Bovendien kan zij behulpzaam

zijn bij het richting geven aan verder onderzoek door de cruciale punten bloot te leggen die verder onderzoek vergen.

1.2 Probleemstelling

Binnen het systeemonderzoek verzuring bestaat momenteel grote behoefte aan het kwantificeren van de onzekerheden in de voorspellingen die door het DAS-model geleverd worden (Schneider en Bresser, 1988). Het DAS-model is opgebouwd uit een aantal deelmodellen (model voor emissie-depositie relatie; modellen voor effecten op bodem, vegetatie, aquatische systemen, materialen en landbouwgewassen), die tezamen een kwantitatieve beschrijving proberen te geven van oorzaak-effect relaties (causaliteitsketen).

Binnen het DAS-model vormt het Regional Soil Acidification Model (RESAM; de Vries en Kros, 1989; Kros et al., i.v.) een essentieel onderdeel. RESAM is ontwikkeld om lange termijn effecten van zure depositie op de bodem op nationale schaal te evalueren. RESAM berekent o.a. de jaarlijks gemiddelde fluxen en concentraties van de belangrijkste elementen in karakteristieke bos/bodem-ecosystemen in Nederland. De regionale toepassing zal worden uitgevoerd door in 20 vastgestelde verzuringsgebieden de lange termijn effecten van zure depositie op de meest relevante bodem vegetatie combinaties door te rekenen. Het depositiescenario wordt voor ieder verzuringsgebied aangeleverd door de depositie module van het DAS-model.

In dit rapport wordt verslag gedaan van een onzekerheidsanalyse op het bodemverzuringsmodel RESAM. Uiteraard dient de uiteindelijke evaluatie van de rol van onzekerheden plaats te vinden op het totaalmodel. De complexiteit van het totaalmodel noodzaakt ons echter om de onzekerheidsanalyse in twee fasen op te splitsen. In de eerste fase worden de onzekerheden in de diverse

deelmodellen geanalyseerd. Dit levert mogelijkwijze nuttige informatie voor de verdere ontwikkeling en/of aanpassing van de deelmodellen. In de tweede fase wordt de onzekerheid in het uiteindelijke totaalmodel doorgerekend.

1.3 Doelstelling

Het doel van deze studie is primair het verkrijgen van inzicht in de onzekerheid in relevante modeluitkomsten van RESAM en de bijdrage van diverse modelinputs, modelparameters en variabelen hieraan. Met name dit laatste vormt een essentieel onderdeel omdat op basis hiervan op een meer gerichte wijze data verzameld kunnen worden ten behoeve van de regionale toepassing. In dit kader is ook nagegaan in hoeverre modeluitkomsten met gemiddelde parameterwaarden (die gebruikt worden bij de regionale toepassing) overeenkomen met de gemiddelde modeluitkomsten bij een range aan parameterwaarden.

Naast de toepassing van onzekerheidsanalyse was het verder ontwikkelen van de methodiek hiervoor een secundair doel van deze studie. In dit rapport is derhalve veel nadruk gelegd op de gekozen aanpak.

We hebben ons bij het analyseren van RESAM beperkt tot het doorrekenen van één bos-ecosysteem te weten een Douglasbos op een holtpodzolgrond. De analyse is gericht op het kwantificeren van de onzekerheden in de jaargemiddelde pH, de jaargemiddelde NO_3 -concentratie en de jaargemiddelde NH_4/K - en Al/Ca -molratio's, in de wortelzone, ten gevolge van de onzekerheden in de modelinputs, modelparameters en de beginvoorwaarden.

1.4 Indeling van het rapport

De indeling van het rapport is als volgt: In hoofdstuk 2 wordt een methodologie voor onzekerheidsanalyse geschetst en de toegepaste methode gepresenteerd. Het model RESAM wordt daarna kort beschreven in hoofdstuk 3. Vervolgens worden in hoofdstuk 4 de onzekerheidsbronnen die we bij de analyse betrekken geïnventariseerd en gekwantificeerd. In hoofdstuk 5 worden de resultaten van de onzekerheidsanalyse gepresenteerd en besproken. Tenslotte eindigen we met conclusies en slotopmerkingen (hoofdstuk 6). Een literatuurlijst completeert het geheel.

2 METHODOLOGIE VAN ONZEKERHEIDSANALYSE

2.1 Aanpak

Onzekerheidsanalyse is een nog relatief jonge tak van de toegepaste wiskunde die inzicht probeert te geven in de aard, de oorzaken en effecten van onzekerheden bij modelberekeningen. Het is een onderwerp dat een steeds belangrijkere plaats inneemt bij het wiskundig modelleren van praktische problemen (zie bijv. Janssen et al., 1990). Het modelonderzoek zal dan ook gebaat zijn met een methodologie die de globale lijnen schetst, waarlangs een onzekerheidsanalyse dient plaats te vinden.

Gebruik makend van Alcamo en Bartnicki (1987), Janssen et al. (1990), wordt een overzicht gegeven van de belangrijkste stappen die bij een onzekerheidsanalyse aan bod dienen te komen.

1. *Formuleren van de probleemstelling*

Het formuleren van de probleemstelling is van vitaal belang, maar wordt in de praktijk helaas al te vaak verwaarloosd. We dienen te verduidelijken waarom onzekerheidsanalyse nodig is, wat we willen weten en in welke vorm we de informatie willen hebben zoals:

- welke grootheden beschouwen we op welke tijd en ruimteschaal (deze kunnen grote invloed hebben op de verwachte onzekerheden (Alcamo en Bartnicki, 1985))?
- zijn we geïnteresseerd in een globale beschrijving van die onzekerheid (bijv. in de vorm van gemiddelde en variantie)?
- of hebben we meer gedetailleerde informatie nodig (bijv. bepaalde kritische overschrijdingskansen voor milieu gevaarlijke stoffen)?

2. *Inventarisatie van onzekerheidsbronnen*

Onzekerheid kan enerzijds een gevolg zijn van onwetendheid: kennis van de bestudeerde processen is vaak onvolledig en de

beschikbare meetgegevens zijn in het algemeen onnauwkeurig en onvolledig. Anderzijds kan onzekerheid ook een inherent aspect zijn van de bestudeerde processen zelf: veel verschijnselen kenmerken zich door een grote natuurlijke variabiliteit (in tijd en/of plaats). Beide vormen van onzekerheid kunnen zich in het model manifesteren door:

- onzekerheid in modelstructuur (de vorm van de vergelijkingen die het model beschrijven): het model wordt ontwikkeld op basis van allerlei aannamen en verwaarlozingen en zal diensgevolge de werkelijkheid niet exact representeren;
- onzekerheid in de modelingangen (externe factoren): er is vaak onduidelijkheid over de exacte inwerking van de omgeving op het systeem/proces; allerlei moeilijk of niet waarneembare versturende invloeden kunnen optreden (bijv. het weer). Ook bepaalde ingangsscenario's kunnen onzekere elementen bevatten. Zo zijn in het bodemverzuringmodel RESAM de deposities van de diverse stoffen, modelingangen die in wezen onzeker zijn;
- onzekerheid in de beginrandvoorwaarden: veelal is over de beginsituatie van de modelvariabelen, die bij de voorspelling van de modeluitgangen gebruikt worden, relatief weinig bekend. Dit kan een cruciale onzekerheid vormen bij (toekomst)voorspelling;
- onzekerheid in de modelparameters: het model bevat veelal diverse (constante) coëfficiënten die het modelgedrag karakteriseren. De exacte waarde van deze grootheden kan vaak niet worden aangegeven bijv. ten gevolge van meetfouten, schattingsfouten, het geaggregeerde karakter van deze grootheden, de natuurlijke variabiliteit van deze grootheden, enz.

Daarnaast kunnen nog onzekerheden, of beter gezegd fouten, optreden bij de implementatie en het runnen van een mathematisch model: bijv. een verkeerde keuze van numerieke oplossingsmethoden, fouten in databewerking en -communicatie; programmeerfouten enz. Uiteraard zullen altijd afbreek- en afrondfouten bij het rekenen met de computer voorkomen. We zullen deze fouten niet bij onze onzekerheidsanalyse betrekken; we gaan er vanuit dat het

geïmplementeerde model op deze zaken voldoende gechecked is (programmaverificatie), en dat deze foutenbronnen slechts een betrekkelijk geringe bijdrage hebben.

3. Kwantificering van de onzekerheidsbronnen

Door het grote aantal mogelijke onzekerheidsbronnen is het vaak niet mogelijk om alle bronnen te kwantificeren. Enige reductie is vereist en kan bijv. verkregen worden op basis van inzicht en voorkennis, en/of op basis van eenvoudige gevoeligheidsanalyses. Voorzichtigheid is hier echter op zijn plaats, wegens het vaak subjectieve en onvolledige karakter van deze zgn. screenings-technieken en het gevaar van "wishful thinking" (Downing et al., 1985; Janssen et al., 1990). De kwantificering van de onzekerheidsbronnen zal mede afhangen van de aard van de onzekerheid en van de aanwezige kennis daarover. Zo blijkt onzekerheid in de modelstructuur vaak moeilijk of onmogelijk te kwantificeren, omdat niet bekend is hoe het werkelijke systeem er exact uitziet. De onzekerheid in de overige bronnen (vooral in de parameters en de beginvoorwaarden) wordt veelal vastgelegd door het specificeren van kansverdelingen middels het opgeven van gemiddelde, standaarddeviatie of variatie-coëfficiënt (standaarddeviatie/gemiddelde), minimum, maximum, vorm van de verdeling, en door het aangeven van eventuele correlaties.

4. Evaluatie van de onzekerheid in de modeluitkomsten

Vervolgens wordt de onzekerheid in de modeluitkomsten berekend ten gevolge van de verschillende onzekerheidsbronnen. Deze informatie kan in verschillende vormen worden vastgelegd, zoals:

- bepaling van waardenbereik van de modeluitkomst;
- gemiddelde en variantie;
- verdelingsfunctie/histogram;
- percentiel waarden bijv. 2,5, 50 (mediaan) en 97,5.

5. Evaluatie van de bijdrage van de onzekerheidsbronnen

Met de voorgaande fasen wordt een beeld verkregen van de totale onzekerheid in de modelresultaten. In fase van evaluatie van de

bijdrage van de onzekerheidsbronnen probeert men te ontdekken welke onzekerheidsbronnen belangrijk bijdragen tot deze totale onzekerheid. Hierbij worden veelal statistische technieken gebruikt, zoals regressie- en correlatie-analyse (zie par. 2.3).

De voorgaande stappen leveren uiteindelijk een duidelijker beeld van de diverse onzekerheidsbronnen en hun invloed op de onzekerheid op de modeluitkomsten. De verkregen resultaten zijn strikt genomen slechts geldig onder de veronderstelling dat de diverse onzekerheidsbronnen inderdaad juist geselecteerd en beschreven zijn. Indien er bijv. geen rekening gehouden is met de onzekerheid in de modelstructuur, en als deze in de praktijk niettemin groot blijkt te zijn, dan zijn de uitkomsten van de onzekerheidsanalyse uiteraard discutabel.

Uiteindelijk dient dan ook de cruciale vraag gesteld te worden: "hoe goed en/of betrouwbaar is de uitgevoerde onzekerheidsanalyse?". Een belangrijk aspect hierbij zal de (on)gevoeligheid (robuustheid) van de resultaten voor de gebruikte veronderstellingen zijn. Dit geeft dan ook aanleiding tot de volgende stap.

6. Uitvoeren van een robuustheidsstudie van de resultaten

Nagegaan dient te worden of de uitkomsten wezenlijk veranderen indien bijv. de kansverdelingen en de correlaties van de onzekerheidsbronnen waarover onvoldoende betrouwbare informatie voorhanden is, anders gespecificeerd zijn. Indien dit het geval is, dan is het van groot belang om nauwkeurige specificaties van die grootheden te hebben/krijgen.

Hiermee is een onzekerheidsanalyse echter nog niet teneinde. In veel gevallen zal de onzekerheid in de modeluitkomsten niet-acceptabel hoog blijken te zijn, en zal gezocht moeten worden naar wegen om deze te verminderen. Hierbij kunnen de resultaten uit de voorgaande stappen ons de richting wijzen. Dit resulteert in de volgende stap, reductie van de onzekerheden en hun invloed.

7. Reductie van de onzekerheden en hun invloed

Reductie van de onzekerheid in de onzekerheidsbronnen is in het algemeen slechts mogelijk, indien deze onzekerheid te wijten is aan onze onvolledige/onnauwkeurige kennis en meetdata. Onzekerheid als gevolg van de inherente natuurlijke variabiliteit kan daarentegen niet, of slechts via gerichte ingrepen in het proces, gereduceerd worden ("fact of life").

Diverse mogelijkheden staan ter beschikking om de onzekerheden en hun invloeden te reduceren:

- reductie van de onzekerheid in de onzekerheidsbronnen die de belangrijkste bijdrage leveren. Dit kan:
 - direct, door het verrichten van extra metingen aan de onzekerheidsbronnen;
 - indirect (indien geen rechtstreekse metingen beschikbaar zijn) door onzekerheidsbronnen/parameters nauwkeuriger te bepalen via afstemming van modeluitkomsten op veldwaarnemingen (modelcalibratie). Eventueel zijn hiervoor additionele veldwaarnemingen gewenst.
- reductie van de onzekerheid in modeluitkomsten door partitionering van de modeluitkomsten, bijv. naar acceptabele en niet-acceptabele uitkomsten op basis van informatie over het systeem. Zo'n partitionering van de uitkomstenruimte induceert een partitionering van de "bronnen-ruimte", in bronwaarden die aanleiding geven tot acceptabel gedrag resp. niet-acceptabel gedrag. Gebruik van deze geïnduceerde specificatie bij het doorrekenen van het model zal in het algemeen aanleiding geven tot modeluitkomsten die grotere nauwkeurigheid hebben (zie bijv. Hornberger et al., 1986; Kämäri et al., 1986).
- tenslotte kan de onzekerheid verkleind worden door modelverbetering, bijv. door een nauwkeurigere modellering van de cruciale aspecten en door simplificatie van de minder belangrijke aspecten (aggregatie/disaggregatie; Hettelingh en Gardner, 1988).

Het is duidelijk dat het welslagen van deze reductie-stap afhankelijk zal zijn van de inventiviteit en het inzicht van de onderzoeker, de hoeveelheid en de kwaliteit van de meetgegevens en de beschikbaarheid van (voor)kennis over het probleem. Juist deze laatste stap illustreert hoe de resultaten van een onzekerheidsanalyse aanleiding kunnen geven tot nieuwe inzichten en het verleggen van onderzoeksaccenten.

2.2 De gebruikte methode

2.2.1 Inleiding

Er zijn diverse technieken ontwikkeld voor het uitvoeren van onzekerheidsanalyses. In Janssen et al. (1990) wordt hiervan een uitgebreide inventarisatie gegeven. Een veel gebruikte methode is gebaseerd op het gebruik van Monte Carlo-simulaties. Hierbij wordt verondersteld dat de onzekerheid van de onzekerheidsbronnen in statistische termen gekarakteriseerd kan worden, en wel in de vorm van (simultane) kansverdelingen. Vervolgens worden verschillende trekkingen (sampling) uit deze verdelingen verricht en worden voor elke serie getrokken waarden de bijbehorende model-uitkomsten via model-simulaties berekend. Uit de resultaten kan dan rechtstreeks het gemiddelde, de variantie enz. van de model-uitkomsten geschat worden. Het aantal benodigde trekkingen en/of Monte Carlo-simulatieruns voor het verkrijgen van nauwkeurige schattingen zal in het algemeen afhangen van gekozen trekkings-(sampling)-methode. Vooral voor rekenintensieve modellen zal men het aantal simulatieruns niet onnodig hoog willen laten oplopen.

Een sampling techniek die hieraan tegemoet komt, is de recent ontwikkelde Latin Hypercube Sampling (LHS)-methode, die beschreven staat in McKay et al. (1979) en Iman en Conover (1980, 1982). Deze methode wordt op steeds ruimere schaal toegepast en levert een geschikt en flexibel instrument voor het uitvoeren van

onzekerheidsanalyses (zie Downing et al., 1985; Hoffman en Gardner, 1983; Iman en Helton, 1985, 1988; Gardner et al., 1983; Kämäri et al., 1986; McWilliams, 1987).

2.2.2 Het programma PRISM

Voor de hier gerapporteerde Monte Carlo-onzekerheidsanalyse via LHS is gebruik gemaakt van een aangepaste versie van het PRISM-programma-pakket (Gardner et al., 1983). Dit programma pakket is opgebouwd uit drie onderdelen (fig. 1).

PRISM1

PRISM1 produceert een verzameling aselechte combinaties van parameters en variabelen via een vooraf opgegeven aantal trekkingen uit vooraf gespecificeerde (kans)verdelingen en correlaties (stap 2 en stap 3 in par. 2.1). De trekking verloopt via Latin Hypercube Sampling, waarbij (voor het meenemen van correlaties) gebruik wordt gemaakt van de procedure van Iman en Conover (1982). De informatie over de kansverdeling die aan PRISM1 moet worden aangeboden, verloopt via specificatie van het gemiddelde, de standaarddeviatie, minimum- en maximumwaarden en de vorm van de kansverdeling (uniform, normaal, lognormaal, triangulair of via zelfgegeven histogrammen). Deze informatie is vastgelegd in de input-data file DATA.dat. De via LHS gegenereerde trekkingen worden opgeslagen in de output-data file PRISM1.dat.

PRISM2

PRISM2 zorgt ervoor dat het te analyseren model (in deze situatie RESAM) gerund wordt met de gegevens uit de PRISM1.dat file. De modeluitkomsten uit deze simulatieruns worden (tezamen met de resultaten uit PRISM1.dat) weggeschreven naar een datafile PRISM2.dat.

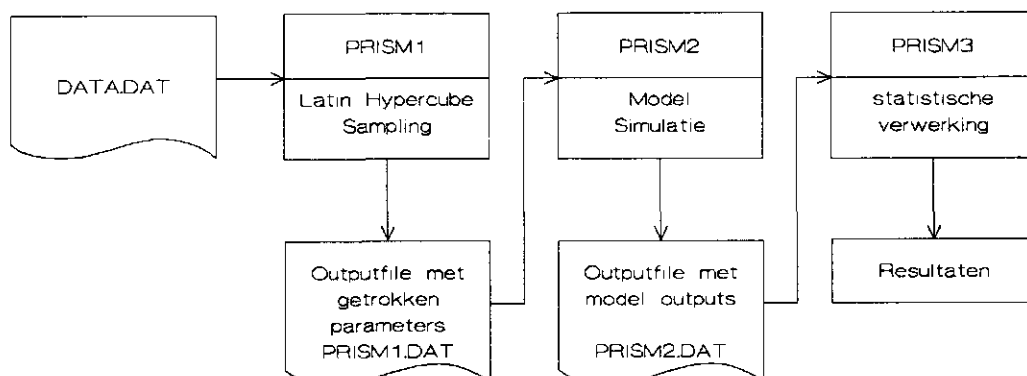


Fig. 1 Structuur van het PRISM-pakket voor het uitvoeren van onzekerheidsanalyses.

PRISM3

In PRISM3 worden de resultaten uit PRISM2.dat onderworpen aan statistische analyses die informatie geven over de rol van de onzekerheden bij de modelresultaten.

- Allereerst wordt er algemene statistische informatie vastgelegd in de vorm van gemiddelde, standaarddeviatie, histogrammen, cumulatieve frequentieverdelingen enz. (zie stap 4 in par. 2.1). Voor deze analyses is gebruik gemaakt van een aanpassing van het programma CUMUL.
- Vervolgens wordt de bijdrage van de diverse onzekerheidsbronnen gespecificeerd en gerangschikt op basis van correlatie en regressie-berekeningen en niet-parametrische statistische methoden (zie par. 2.3). Hiertoe werd eigen programmatuur ontwikkeld, tevens gebruik makend van het statistische pakket GENSTAT.

2.3 Analyse van de onzekerheidsbronnen

PRISM3 analyseert de modelresultaten uit de Monte Carlo-simulaties op hun statistische eigenschappen. Om de invloed van de verschillende bronnen afzonderlijk zichtbaar te maken, wordt gebruik gemaakt van correlatie- en regressie-analyse, en niet-parametrische statistische methoden. Deze technieken zullen we nu in het kort toelichten. In paragraaf 5.2 geven we resultaten van hun toepassing op het bodemverzuringmodel RESAM.

2.3.1 Correlatie-analyse

Een populaire maat om het verband tussen de modeluitkomst (zeg y) en een onzekerheidsbron (zeg x) weer te geven, is de lineaire correlatie-coëfficiënt (LCC), of Pearson correlatie-coëfficiënt (Draper en Smith, 1981; Conover, 1971). Nemen we aan dat we N "waarden" ($x(i)$, $y(i)$) $i=1, \dots, N$, beschikbaar hebben van de grootheden x en y , (bijv. afkomstig van N simulatieruns) dan wordt deze coëfficiënt ($r_{xy} = \text{LCC}$) uitgedrukt door de volgende vergelijking:

$$r_{xy} = \frac{\sum (x(i) - \bar{x})(y(i) - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x(i) - \bar{x})^2} \sqrt{\sum (y(i) - \bar{y})^2}} \quad (1)$$

waarbij \bar{x} en \bar{y} het gemiddelde van de $x(i)$'s en de $y(i)$'s aanduiden:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum x(i), \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum y(i) \quad (2)$$

(De sommatie in vergelijking (1) en (2) loopt van $i=1, \dots, N$).

De waarde van r_{xy} ligt tussen -1 en $+1$. r_{xy} heeft de waarde 1 (volledige positieve correlatie) als de data ($x(i)$, $y(i)$) op een

rechte lijn liggen met positieve helling; de grootte van de helling heeft geen invloed op r_{xy} . r_{xy} heeft de waarde -1 (volledige negatieve correlatie) als de data op een rechte lijn liggen met negatieve helling, ongeacht de grootte van de helling. Een waarde van r_{xy} in de buurt van nul duidt erop dat x en y ongecorrleerd zijn.

De coëfficiënt r_{xy} zegt niets over het achterliggende functionele verband tussen x en y, maar enkel over de mate van lineariteit in de betrekking tussen x en y. Dit is geïllustreerd in fig. 2.

x en y kunnen bijvoorbeeld een duidelijk functioneel verband hebben, maar toch geen correlatie (fig. 2e). De grootte r_{xy} heeft een tweetal nadelen:

- als y verder ook nog afhangt van andere grootheden, zeg z_1, \dots, z_h , en als x bovendien sterk gecorrleerd is met deze grootheden, dan geeft r_{xy} niet meer het "directe" effect van x op y weer. De effecten die via de gecorrleerde grootheden z_1 verlopen zijn immers ook in r_{xy} verdisconteerd;
- als de relatie tussen x en y een sterk niet-lineair karakter heeft, dan geeft deze r_{xy} een slecht beeld van het verband tussen x en y.

In een poging om het eerste bezwaar het hoofd te bieden wordt in de literatuur vaak gebruik gemaakt van de zgn. partiële correlatie-coëfficiënt (PCC; zie Draper en Smith 1981). Hierbij worden allereerst x en y gecorrigeerd voor alle lineaire effecten in de grootheden z_1, \dots, z_h :

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= x - \alpha_1 z_1 - \dots - \alpha_h z_h \\ \tilde{y} &= y - \gamma_1 z_1 - \dots - \gamma_h z_h\end{aligned}$$

waarbij $\alpha_1, \dots, \alpha_h$ en $\gamma_1, \dots, \gamma_h$ zo gekozen zijn dat ongecorrleerd zijn met z_1, \dots, z_h . De correlatie-coëfficiënt van de aldus gecorrigeerde \tilde{x} en \tilde{y} is de partiële correlatie-coëfficiënt en wordt als maat voor de individuele lineaire bijdrage van x tot y gebruikt.

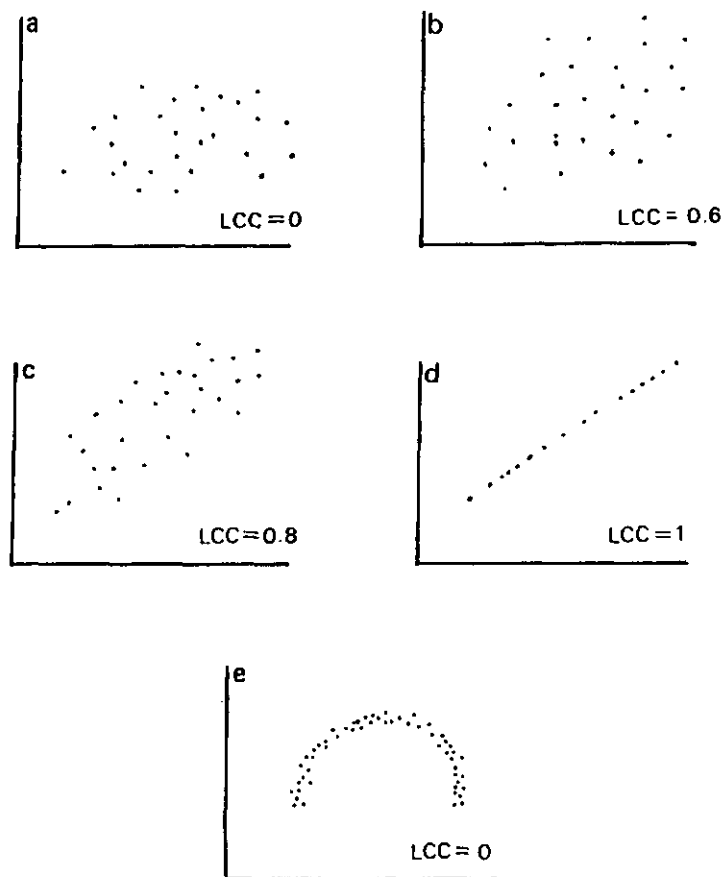


Fig. 2 Voorbeelden van scatterplots met de bijbehorende waarden van de correlatie-coëfficiënt (*LCC*).

In Janssen et al. (1990) wordt er echter op gewezen dat de PCC een vertekend beeld kan geven van de lineaire relatie tussen x en y , vooral indien de correlatie tussen x en z_1, z_2, \dots, z_h gering is. Reden hiervan is dat óók y gecorrigeerd wordt voor de invloed van z_1, \dots, z_h . Laten we deze correctie achterwege, en kijken we alleen naar de correlatie $r_{\tilde{x}y}$ van de gecorrigeerde \tilde{x} met de oorspronkelijke y , dan krijgen we een nieuwe maat, die de semi-partiële correlatie-coëfficiënt (SPC; "Semi Partial Coefficient")

genoemd wordt. Ook de SPC geeft echter geen adequaat beeld van de lineaire bijdrage van x tot y , indien de correlatie van x met de z_1, \dots, z_h groot is (Janssen et al. 1990).

Het bovenstaande wijst erop dat het eerste bezwaar (onderlinge correlaties tussen x en z_1, \dots, z_h) slechts ten dele kan worden opgeheven met de voorgestelde maten; dit in tegenstelling tot de suggestie die in de gangbare literatuur gewekt wordt (Iman en Helton, 1985; 1988).

Omdat bovengenoemde maten gericht zijn op het beschrijven van de lineaire relatie tussen x en y , zullen ze ook het tweede bezwaar (niet lineaire relatie) niet opheffen. Dit bezwaar kan gedeeltelijk ondervangen worden door gebruik van data-transformaties. Op basis van data-analyse (bijv. scatter-plots) kunnen we vaak nuttige informatie krijgen over toe te passen data-transformaties (bijv. logaritmische transformatie). In de praktijk wordt veel gebruik gemaakt van de Box-Cox transformatie (zie Draper en Smith, 1981).

Iman en Conover (1979) bevelen bij niet-lineaire relaties en uitbijters in de data de rangtransformatie aan die een belangrijke rol speelt in de niet-parametrische statistiek (Conover, 1971). Deze transformatie heeft een discontinu karakter en komt neer op het vervangen van de waarden van de grootheden door hun rangorde. Bij N waarden $(x(i), y(i))$ van de grootheden x en y , worden allereerst hun rangen bepaald door de kleinste $x(i)$ de waarde 1 te geven, de op één na kleinste de waarde 2, enz. tot en met de waarde N ; analoog voor $y(i)$.

Voor deze ranggetransformeerde data kan vervolgens de correlatie-coëfficiënt berekend worden. Deze grootheid wordt de rang-correlatie-coëfficiënt (RCC) of Spearman's correlatie-coëfficiënt genoemd. In feite geeft de RCC een maat voor de monotonie in de relatie tussen x en y (d.w.z. als x stijgt dan stijgt (of daalt) y). Een waarde in de buurt van +1 duidt erop dat y toeneemt als x

toeneemt, terwijl RCC in de buurt van -1 erop wijst dat y afneemt als x toeneemt. Waarden in de buurt van 0 duiden erop dat er geen "monotone" relatie is tussen x en y (fig. 3).

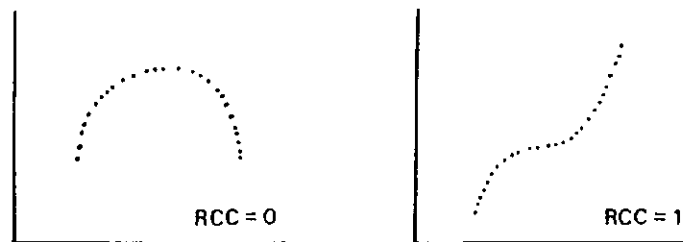


Fig. 3 Voorbeelden van scatterplots met de bijbehorende waarden van de rangcorrelatie-coëfficiënt (RCC).

We merken op dat het eerste bezwaar ook voor de RCC geldt, indien y tevens afhangt van z_1, \dots, z_h , en deze grootheden een sterke (rang) correlatie vertonen met x .

In dit geval kunnen we onze toevlucht nemen tot de partiële rangcorrelatie-coëfficiënt (PRCC) of de semi-partiële rangcorrelatie-coëfficiënt (SPRC), d.w.z. de partiële correlatie-coëfficiënt resp. de gecorrigeerde correlatie-coëfficiënt voor de

ranggetransformeerde data. De bovengenoemde kanttekeningen bij de PCC en de SPC gelden echter ook voor de PRCC en de SRPC.

2.3.2 Regressie-analyse

Bij gebruik van lineaire regressie-analyse wordt de relatie tussen de modeluitkomsten (zeg y), en de diverse onzekerheidsbronnen (zeg x_1, \dots, x_p), benaderd door een lineair model, het zgn. lineaire regressie-model. Dit model heeft bijv. de volgende vorm:

$$y \approx \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_p x_p \quad (3)$$

De lineariteit heeft betrekking op het lineair voorkomen van de coëfficiënten β_j .

Uiteraard kunnen ook meer ingewikkelde regressie-modellen bestudeerd worden, bijv. met toevoeging van kwadratische termen $x_i x_j$. We laten deze echter buiten beschouwing.

De zgn. "regressie-coëfficiënten" β_k ($k=0, 1, \dots, p$) kunnen bepaald worden via de kleinste kwadraten-methode. Indien $y(i), x_1(i), \dots, x_p(i)$ de waarden in de i -de simulatie-run zijn ($i=1, \dots, N$), dan zijn de geschatte regressie-coëfficiënten $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p$ de coëfficiënten die de kwadratensom

$$\sum_{i=1}^N [y(i) - (\beta_0 + \beta_1 x_1(i) + \dots + \beta_p x_p(i))]^2 \quad (4)$$

minimaliseren.

Het resulterende lineaire regressie-model is uiteraard slechts een benadering van het oorspronkelijke model. Een veel gebruikte maat voor de geschiktheid van deze benadering is de grootheid R^2 (zie Draper en Smith, 1981):

$$R^2 = \frac{\sum (\hat{y}(i) - \bar{y})^2}{\sum (y(i) - \bar{y})^2} \quad (5)$$

Hierbij is

$$\hat{y}(i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1(i) + \dots + \hat{\beta}_p x_p(i) \quad (6)$$

de uitgang berekend op basis van het regressie-model. \bar{y} is het gemiddelde van de $y(i)$ ($i=1, \dots, N$).

R^2 meet de fractie van de totale variatie (rond het gemiddelde \bar{y}) die door het regressie-model verklaard kan worden, en is een getal tussen 0 en 1. Een R^2 in de buurt van 1 duidt erop dat het regressie-model deze variatie goed kan verklaren (goede fit). R^2 wordt meestal de "coefficient of determination" (COD), ofwel de bepaaldheidscoëfficiënt, genoemd (Draper en Smith, 1981).

De regressie-coëfficiënten $\hat{\beta}_k$ ($k=1, \dots, p$) leveren op zich nog geen goede maat voor de (lineaire) bijdrage van de bronnen tot de onzekerheid in de modeluitkomst y . Daartoe dienen we ook de grootte van de onzekerheid in de bronnen x_k mee te nemen. Er geldt immers dat de (geschatte) variantie van y (S_y^2) gelijk is aan (Draper en Smith, 1981).

$$S_y^2 = S_{\hat{y}}^2 + S_{\hat{e}}^2 \quad (7)$$

waarbij \hat{e} het residu is dat overblijft na regressie van y op x_1, \dots, x_p volgens:

$$\hat{e}(i) = y(i) - [\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1(i) + \dots + \hat{\beta}_p x_p(i)] \quad i=1, \dots, N \quad (8)$$

De variantie van y is gedefinieerd als:

$$S_y^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y(i) - \bar{y})^2 \quad (9)$$

De definitie van $S_{\hat{y}}^2$ en $S_{\hat{e}}^2$ is analoog aan S_y^2 . $S_{\hat{y}}^2$ weerspiegelt de totale lineaire bijdrage van de bronnen aan de onzekerheid (of beter gezegd: de variantie) in y . Rekenwerk levert:

$$S_{\hat{y}}^2 = \sum_{k=1}^P \sum_{j=1}^P (\hat{\beta}_k S_{x_k}) (\hat{\beta}_j S_{x_j}) \cdot r_{x_k x_j} \quad (10)$$

waarbij S_{x_k} de (geschatte) standaarddeviatie van x_k is en $r_{x_k x_j}$ de (geschatte) correlatie-coëfficiënt tussen x_k en x_j . Uit deze beschouwing volgt dat $\hat{\beta}_k S_{x_k}$ wel een maat voor de lineaire bijdrage van de individuele onzekerheidsbron x_k is, tenminste indien $r_{x_k x_j} = 0$ voor $k \neq j$, d.w.z. indien x_k en x_j ongecorreleerd zijn.

Ditzelfde komt ook tot uitdrukking bij het zgn. gestandaardiseerde regressie-model dat tot stand komt door normalisatie van de data met hun geschatte gemiddelde en standaarddeviatie (Draper en Smith, 1981):

$$\frac{y - \bar{y}}{S_y} \approx \beta_1^{(s)} \frac{x_1 - \bar{x}_1}{S_{x_1}} + \dots + \beta_p^{(s)} \frac{x_p - \bar{x}_p}{S_{x_p}} \quad (11)$$

Gebruik van normalisatie voorkomt dat de schaal en de eenheden invloed hebben op de evaluatie van de bijdrage van de afzonderlijke bronnen x_k . De gestandaardiseerde regressie-coëfficiënten ($\text{SRC} = \hat{\beta}_i^{(s)}$) die uiteindelijk een minimale kwadratensom opleveren bij het regressie-model (vergelijking 11), zijn gelijk aan:

$$\hat{\beta}_k^{(s)} = \hat{\beta}_k \frac{S_{x_k}}{S_y} \quad (12)$$

Deze grootte is dimensieloos en vormt een maat voor de relatieve verandering van y ten opzichte van zijn standaarddeviatie, ten gevolge van een relatieve verandering van x_k ten opzichte van

zijn standaarddeviatie. Aan de hand van de grootte van de absolute waarden van de SRC's kan een rangorde van de invloed van de diverse onzekerheidsbronnen verkregen worden. Deze rangorde is dezelfde, indien we de grootte $\hat{\beta}_k S_{x_k}$ als maat hanteren voor de bijdrage van de onzekerheidsbronnen.

Een andere regressie-grootte in de literatuur om de bijdrage van een onzekerheidsbron uit te drukken, is de relatieve partiële kwadraten som (relative partial sum of squares; RPSS (Dale et al., 1988; Hettelingh, 1989)). Deze grootte definieert de onzekerheidsbijdrage van x_k als het relatieve verlies in verklaarde variantie dat resulteert, indien de onzekerheidsbron x_k uit de lineaire regressie wordt weggelaten:

$$(\text{RPSS})_k = \frac{S_{\hat{e}|k}^2 - S_{\hat{e}}^2}{S_y^2} \quad (13)$$

Hierbij is $S_{\hat{e}}^2$ de geschatte variantie van het residu dat overblijft na regressie van y op x_1, \dots, x_p (vergelijk (8)), en $S_{\hat{e}|k}^2$ de geschatte variantie in het residu dat overblijft na regressie van y op $x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_p$ (gereduceerde regressie). $100 \cdot (\text{RPSS})_k$ kan in deze context bij benadering gezien worden als de procentuele bijdrage van de bron x_k tot de onzekerheid in y . De RPSS-maat is sterk gerelateerd aan de eerder gepresenteerde semi-partiële correlatie-coëfficiënt SPC, nl.:

$$(\text{RPSS})_k = [(\text{SPC})_k]^2 \quad (14)$$

en rangschikking van de RPSS in grootte-orde komt dus overeen met rangschikking van de absolute waarde van de SPC's. Deze rangschikking komt op zijn beurt weer overeen met de rangschikking van de PCC's (zie Janssen et al., 1990 voor deze resultaten).

Hoewel bovenstaande grootheden in de literatuur (Dale, 1988; Iman en Helton, 1988) gepropageerd worden als geschikte maten om de

onzekerheidsbijdrage van de diverse bronnen x_k te meten, wordt in Janssen et al. (1990) aangetoond, dat ze een inadequaar beeld kunnen geven indien de bronnen x_k onderling gecorreleerd zijn. In laatstgenoemde referentie wordt daarom een verbeterde maat voorgesteld, waarmee de relatieve verandering in de onzekerheid van de modeluitkomst y ten gevolge van een (kleine) relatieve verandering in de onzekerheid van de bron x_k bepaald wordt, rekening houdend met het indirecte effect dat een verandering in de onzekerheid van x_k heeft op de onzekerheid van de bronnen x_j die met x_k gecorreleerd zijn. Dit resulteert uiteindelijk in de samengestelde maat die Partial Uncertainty Contribution (PUC) wordt genoemd en gedefinieerd is als:

$$(PUC)_k = \sum_{j=1}^p \hat{\beta}_j^{(s)} \cdot r_{x_j y} \cdot r_{x_k x_j} = \sum_{j=1}^p (SRC)_j (LCC)_j^2 r_{x_k x_j}^2 \quad (15)$$

De PUC geeft de relatieve onzekerheidsverandering in S_y weer door een (kleine) relatieve onzekerheidsverandering in S_{x_k} , bij handhaving van de correlatiestructuur tussen de x_j 's. Indien er geen onderlinge correlaties zijn dan kan de $(PUC)_k$ vereenvoudigd worden tot (zie Janssen et al., 1990):

$$(PUC)_k = (SRC)_k (LCC)_k = (SRC)_k^2 \quad (16)$$

In dit specifieke geval wordt de onzekerheidsbijdrage adequaat beschreven door de SRC aangezien deze dan identiek is aan de \sqrt{PUC} . De laatstgenoemde maat wordt in Janssen et al. (1990) de RTU (Root of the Partial Uncertainty Contribution) genoemd. Door de RTU en de SRC onderling te vergelijken kan eenvoudig worden nagegaan in hoeverre eventueel aanwezig onderlinge correlaties de onzekerheidsbijdrage beïnvloeden (zie ook par. 5.1.2). Ook een vergelijking van de SRC en de LCC leert ons hierover iets: indien de LCC duidelijk van de SRC verschilt, dan zullen de onderlinge correlaties de onzekerheidsbijdrage sterk beïnvloeden (Janssen et al., 1990).

We merken op dat bovenstaande methoden bij de regressie gebruik maken van alle te bestuderen onzekerheidsbronnen, en hen op orde van grootte rangschikken. Deze rangschikking heeft alleen betekenis voor de belangrijkste bronnen. De rangnummers van de overige bronnen zijn meestal niet-significant. Vanuit dit oogpunt is het gebruik van "subset-regressie" technieken zinvol. Hierbij wordt geprobeerd uit de (grote) verzameling van verklarende variabelen x_1, \dots, x_p een geschikte deelverzameling te selecteren die een voldoende nauwkeurige regressie-fit oplevert (bijv. selectie van meest significante variabelen). Diverse technieken zijn hiervoor beschikbaar (bijv. voorwaartse en achterwaartse regressie enz.; Seber, 1977; Draper en Smith, 1981). Voor toepassing van deze technieken bij onzekerheidsanalyse verwijzen we naar Iman et al. (1981a,b), McWilliams (1987) en Kinnison (1988). Ook "subset-selectie" kan hinder ondervinden van sterke correlaties tussen de verklarende variabelen x_k (aantasting van stabiliteit en efficiency van de regressie-schatters) (Marquardt en Snee, 1975).

Bij het voorgaande dienen we te bedenken dat de bovengenoemde grootheden zoals SRC's, RPSS's, PUC's en RTU's tot stand kwamen via het lineaire regressie-model, vergelijking (3). Deze grootheden leveren alleen een maat voor de lineaire relatie tussen twee grootheden. De grootte van R^2 geeft een allereerste indruk hoe adequaat zo'n lineaire maat is. (Merk op dat uit vergelijking (5) en (7) volgt dat $R^2 = 1 - S_e^2 / S_y^2$; dus R^2 in de buurt van 1 duidt erop dat de niet-lineaire invloed, die in \hat{e} verdisconteerd is, gering is in vergelijking tot de lineaire bijdrage).

In geval van sterke niet-lineariteiten (die zich bijv. kunnen manifesteren in een kleine R^2) zijn bovenstaande maten niet bruikbaar en is het gebruik aan te bevelen van:

Data-transformaties

Het gebruik van bijv. ranggetransformeerde data (zie ook par. 2.3.1) bij regressie levert informatie over de monotonie. De bijbehorende gestandaardiseerde regressie-coëfficiënten worden de

gestandaardiseerde rangregressie-coëfficiënten (SRRC's) genoemd, terwijl de bijbehorende relatieve partiële kwadratensommen worden aangeduid met RPRSS (Relative Partial Rank Sum of Squares). De "coefficient of determination" die bij de regressie op de rang-getransformeerde data hoort, geven we weer met de afkorting RCOD. Op een soortgelijke wijze kan ook nog de PUC en RTU voor de rang-getransformeerde data (resp. de RPUC; Rank Partial Uncertainty Contribution en RRTU; Root of the Partial Uncertainty Contribution) gedefinieerd worden. Het is echter onduidelijk wat deze grootheden over de onzekerheidsbijdrage van de diverse bronnen vertellen. De onzekerheidsaspecten van de oorspronkelijke data hebben immers niets te maken met de onzekerheidsaspecten van de ranggetransformeerde data (bedenk dat de ranggetransformeerde data alle dezelfde verdeling, variantie en gemiddelde hebben).

Het gebruik van andere (continue) data-transformaties bij regressie-analyse, bijv. logaritmisch, kan een realistischer beeld van de bijdrage van de verschillende bronnen geven. Dit omdat deze getransformeerde data, in tegenstelling tot de rang-getransformeerde data, wel alle informatie over de oorspronkelijke data in zich dragen. Scatterplots kunnen vaak nuttige informatie geven over welke data voorbewerking/transformatie geschikt is (Iman en Helton, 1985).

Meer ingewikkelde regressie-modellen

Het eenvoudige eerste-orde lineaire regressie-model uit vergelijking (3) kan worden vervangen door een ingewikkelder model, bijv. door toevoeging van kwadratische termen enz. Behalve deze polynoom-regressie-modellen (Seber, 1977 en Draper en Smith, 1981) zijn er legio andere mogelijkheden te bedenken. Bij het opstellen van zo'n ingewikkelder regressie-model wordt in het algemeen gebruik gemaakt van proces-kennis en informatie uit data-analyse (bijv. scatter-plots) (Iman en Helton, 1985). Vervolgens kunnen de parameters binnen het regressie-model geschat worden en uitspraken afgeleid worden over de onzekerheidsbijdrage van de diverse componenten in het regressie-model.

Hierbij zal men geconfronteerd worden met soortgelijke aspecten als hierboven beschreven werden (bijv. correlatie).

2.3.3 Niet-parametrische statistische methoden

Ook niet-parametrische statistische methoden kunnen gebruikt worden om de invloed van de onzekerheidsbronnen (met name parameters) op specifieke aspecten van de modeluitkomsten te bestuderen. Daartoe worden de modeluitkomsten gepartitioneerd in twee disjuncte verzamelingen, bijv. boven en onder de mediaan, boven en onder het 90ste percentiel, acceptabel gedrag versus niet-acceptabel gedrag (Hornberger en Spear, 1981; Saltelli en Marivoet, 1986; Hornberger, Cosby en Galloway, 1986). Dit induceert een overeenkomstige partitionering van de bronnen (parameters). Vervolgens wordt geprobeerd het verschil te kwantificeren tussen de "kansverdelingen" die bij deze twee gepartitioneerde verzamelingen behoren. Een groot verschil voor een specifieke bron/parameter duidt er op dat deze bron een belangrijke rol speelt in de gepartitioneerde modeluitkomst. Op deze wijze kunnen de bronnen met een belangrijke bijdrage bepaald worden.

Niet-parametrische toetsen (Conover, 1971) worden gebruikt om dit verschil te kwantificeren, te weten de Kolmogorov-Smirnov toets, de Cramer-von Mises toets, de Mann-Whitney toets enz. We gaan hier verder niet in op de specifieke eigenschappen van deze toetsen, maar merken wel op dat de bovengenoemde technieken in wezen geen kwantificatie geven van de onzekerheidsbijdrage van een bron (parameter). Veeleer geven ze een globale indicatie van het belang van een bron voor een specifiek aspect van het modelgedrag (bijv. onder/boven de mediaan; onder/boven het 90-percentiel; acceptabel versus niet-acceptabel gedrag enz.). Voor uitgebreidere informatie over het gebruik van zowel parametrische als niet-parametrische toetsen bij onzekerheidsanalyse verwijzen we naar Crick et al. (1987) en Saltelli en Marivoet (1986).

2.3.4 Keuze van de analysetechniek

In de paragrafen 2.3.1 t/m 2.3.3 werd een veelheid van maten gepresenteerd die voor het beoordelen van de relatie tussen onzekerheidsbronnen en modeluitkomsten gebruikt kunnen worden. Deze zijn samengevat in tabel 1.

Tabel 1 Maten voor de invloed van de onzekerheidsbronnen op de onzekerheid in modeluitkomsten.

Analysetechniek	Onzekerheidsmaten	
	originele data	rang-getransformeerde data
Correlatie-analyse	LCC	LRCC
	PCC	PRCC
	SPC	SRPC
Regressie-analyse	SRC	SRRC
	RPSS	RPRSS
	PUC/RTU	RPUC/RRTU
Totale invloed	COD	RCOD
Niet-parametrische toetsen	Kolm.-Smirn.	
	Cram.-v.Mis.	
	Mann-Whitn.	

We staan bij de toepassing voor de belangrijke vraag welke maat we dienen te kiezen. Zoals aangegeven in par. 2.3.1 en par. 2.3.2 hebben al deze maten hun specifieke eigenschappen en tekortkomingen (zie ook Janssen et al., 1990; Crick et al., 1987; Saltelli en Marivoet, 1986).

Het is niet zondermeer mogelijk de beste maat aan te geven. Tevens blijkt uit de literatuur (Iman en Helton, 1985, 1988; Downing et al., 1985; Saltelli en Marivoet, 1986), dat de methoden soms wezenlijk verschillende resultaten kunnen opleveren. Het verdient dan ook aanbeveling om meer dan één methode toe te passen ten einde het vertrouwen in de uitkomst te vergroten.

Om in de geschetste situatie tot een geschikte keuze te komen, is het zinvol om allereerst te onderzoeken in hoeverre de modeluitkomsten door middel van een lineair model benaderd kunnen worden. De COD levert daarvoor een indicatie.

Indien de COD in de buurt van 1 ligt, dan is een lineaire benadering adequaat. De SRC is dan (zie vergelijking (11)) een geschikte maat om de (relatieve) lineaire bijdrage in de onzekerheid weer te geven, althans in de situatie waarbij de onzekerheidsbronnen onderling ongecorrleerd zijn. In deze situatie blijkt tevens de LCC en de SPC gelijk te zijn aan de SRC (Janssen et al., 1990).

Indien er echter correlaties optreden bepalen de SRC's niet meer alleen de bijdrage tot de onzekerheid. Ook de onderlinge correlaties zullen daarbij een rol spelen (zie vergelijking (10)), en dienen dus bij de beschouwing betrokken te worden. De maten die in de gangbare literatuur voor deze situaties aanbevolen worden (nl. de PCC, RPSS en de SPC) zijn echter niet geheel geschikt. Ook de PUC (of de RTU) die werd voorgesteld om aan deze onvolkomenheden het hoofd te bieden blijkt geen waterdichte oplossing te geven. Enerzijds dienen we bij het gebruik en de interpretatie van de PUC (of de RTU) rekening te houden met de voorwaarden waaronder hij is afgeleid (d.w.z. hij beschrijft de verandering in de onzekerheid van de modeluitkomsten ten gevolge van een kleine relatieve verandering in de onzekerheid van de bronnen, hierbij de invloed van een vaste onderlinge correlatiestructuur verdisconterend). Anderzijds kan het gebeuren dat deze

maat, als gevolg van zijn definitie, "zwakkere bronnen" ten onrechte als te belangrijk naar voren laat komen indien ze sterk gecorreleerd zijn met "sterke bronnen".

In dit rapport is hoofdzakelijk van de laatstgenoemde maat gebruik gemaakt. Om echter bovengenoemde "valkuilen" te vermijden en om te voorkomen dat we uit de resultaten verkeerde conclusies trekken, zullen we in "twijfelgevallen" (d.w.z. sterke correlaties een welafgewogen analyse plegen waarbij ook de gegevens van andere maten (SRC's) geraadpleegd worden (par. 5.2.2).

Indien de COD niet in de buurt van 1 ligt, dan is een lineair model geen goede benadering voor de relatie tussen onzekerheidsbronnen en modeluitgangen. Door het toevoegen van hogere orde termen of andere niet-lineaire termen aan het oorspronkelijke regressie-model kan de fit mogelijkserwijs aanzienlijk verbeterd worden.

Een andere mogelijkheid om een beter regressie-model te verkrijgen is het gebruik van data-transformaties. We zouden allereerst kunnen kijken naar de ranggetransformeerde data, en onderzoeken in hoeverre de ranggetransformeerde data door een lineair model benaderd kunnen worden. De RCOD is hiervoor een indicatie. Een RCOD in de buurt van 1 duidt erop dat de ranggetransformeerde data goed door een lineair model benaderd kan worden en geeft aan dat de relatie tussen de oorspronkelijke data vrijwel een "monotoon" karakter heeft. De SRRC's, de SPRC's en de RPSS's leveren dan een maat voor de monotonie in de relatie tussen de individuele onzekerheidsbronnen en de modeluitkomsten. Omdat de onzekerheidsaspecten van de oorspronkelijke data niets te maken hebben met de onzekerheids aspecten van de ranggetransformeerde data (bedenk bijv. dat de ranggetransformeerde data alle dezelfde verdeling, variantie en gemiddelde hebben) blijft het vooralsnog onduidelijk wat de SRRC's, de SPRC's, de RPRSS's, en de RPUC's (of de RRTU's) vertellen over de onzekerheidsbijdrage van de individuele bronnen. Verder onderzoek op dit gebied zal dit

moeten verduidelijken.

In plaats van rang-getransformeerde data, kunnen we ook kijken naar andere (continue) transformaties op de data, bijv. logaritmische enz. Deze hebben het voordeel dat de getransformeerde data in principe alle informatie over de oorspronkelijke data in zich dragen, wat niet het geval is bij het gebruik van rang-getransformeerde data. Regressie op deze getransformeerde data kan dan nuttige informatie leveren over de bijdrage van de diverse onzekerheidsbronnen. In deze studie is hierop echter niet ingegaan.

De keuze van één van de (niet-)parametrische toetsen uit tabel 2.1 is in het voorgaande niet aan de orde geweest. In Saltelli en Marivoet (1986) en Crick et al. (1987) komt vooral de Kolmogorov-Smirnov toets als een geschikte maat naar voren. Deze levert resultaten op die vergelijkbaar zijn met de resultaten van de goede regressie- en correlatiematen. Echter ook hier zal meer onderzoek nodig zijn om de (positieve en negatieve) eigenschappen van deze statistische technieken beter te doorgronden.

3 HET MODEL RESAM

3.1 Modelstructuur

Het model RESAM (Regional Soil Acidification Model) is ontwikkeld met als doel op regionale (nationale) schaal het lange termijn effect van atmosferische depositie op de bodem(vocht)samenstelling te voorspellen. Het berekent o.a. de jaarlijkse, waterflux gemiddelde, concentraties van de belangrijkste kat- en anionen in het bodemvocht (H, Al, Ca, Mg, K, Na, NH_4 , NO_3 , SO_4 , Cl, HCO_3 en RCOO), de kationenbezetting aan het adsorptiecomplex en de Al-voorraad in hydroxiden. De modelstructuur is gebaseerd op de relatie tussen elementkringlopen en zuurproductie en -consumptie in de bodem. Daartoe zijn in het model alle processen opgenomen die een relevant effect hebben op de stofconcentraties (en daarmee op H) in de bodemoplossing. Een overzicht van de opgenomen processen en de wijze van procesbeschrijving is gegeven in tabel 2. Daarbij is onder de rubriek: "type proces" onderscheid gemaakt in biochemische processen (1) en geochemische processen (2) die elk weer onderverdeeld zijn in karakteristieke, bij elkaar horende procescombinaties.

Met uitzondering van blad- en wortelopname, boomgroei, CO_2 -evenwichten, kationenomwisseling en sulfaatadsorptie zijn alle processen beschreven met behulp van een eerste orde reactie. Karakteristieke voorbeelden hiervan zijn nitrificatie en Al-mobilisatie door hydroxide-verwerking die voornamelijk de H-productie en H-consumptie in zure bosgronden reguleren. Eerstgenoemd proces is beschreven als een functie van de NH_4 -concentratie, waarbij de nitrificatiesnelheidsconstante beïnvloed wordt door de pH en de vochttoestand (grondwaterstand). Laatstgenoemde proces is beschreven als functie van de voorraad aan Al-hydroxiden en de mate van onderverzadiging ten opzichte van gibbsiet. Voor een volledig overzicht van alle procesbeschrijvingen verwijzen we naar de Vries en Kros (1989).

Tabel 2 Overzicht van de procesbeschrijvingen in RESAM in relatie tot de beschouwde stoffen.

Type proces	Proces	Procesbeschrijving	Stoffen
1.1 Kronendak interacties	Droge depositie	Evenredig met natte depositie	Ca, Mg, K, Na, Cl
	Bladopname	Evenredig met droge depositie	SO ₂ , NO _x , NH ₃
	Bladuitloging	Eerste orde reactie	Ca, Mg, K
1.2 Boomgroei	Stamgroei	Logistische functie	N, Ca, Mg, K, S
	Takgroei	Evenredig met stamgroei	" " " " "
1.3 Kringloopprocessen	Bladval	Eerste orde reactie	N, Ca, Mg, K, S
	Wortelsterfte	" " "	" " " " "
	Mineralisatie	" " "	" " " " "
	Wortelopname	Meerdere opties ¹⁾	" " " " "
1.4 N-transformaties (oxidatie/reductie)	Nitrificatie	Eerste orde reactie	NH ₄ (NO ₃)
	Denitrificatie	" " "	NO ₃
2.1 Associatie/Dissociatie	Dissociatie van CO ₂	CO ₂ -evenwichten	HCO ₃
	Protonering van RCOO	Eerste orde reactie	RCOO
2.2 Verwerking/Neerslag	Carbonaatverwerking	Eerste orde reactie	Ca
	Silicaatverwerking	" " "	Al, Ca, Mg, K, Na
	Hydroxideverwerking	" " " ²⁾	Al
2.3 Adsorptie/Desorptie	Kationenomwisseling	Gaines-Thomas-evenwichten	H, Al, Ca, Mg, K, Na, NH ₄
	Sulfaatadsorptie/desorptie	Langmuir-evenwicht	SO ₄

1) a. Een vaste opname die bepaald wordt door de vraag vanuit de boom en die verdeeld wordt per bodemlaag op basis van het wateropname patroon.

b. Een variabele opname die bepaald wordt door de wateropname en nutriëntconcentratie per bodemlaag.

2) Dit proces is ook beschreven met een Elovich-vergelijking.

3.2 Modelinitialisatie

De initiële samenstelling van kat- en anionen in bodemvocht en van kationen aan het adsorptiecomplex wordt berekend op basis van verondersteld evenwicht met het heersende huidige depositieniveau. Een schatting voor de concentratie van anionen in bodemvocht wordt gemaakt op basis van de huidige jaarlijkse gemiddelde depositie van deze stoffen en de gemiddelde jaarlijkse waterflux uit elke bodemlaag. Een schatting voor kationen in bodemvocht wordt gemaakt met behulp van omwisselvergelijkingen, op basis van gegeven omwisselconstanten en de gegeven initiële kationenbezetting, onder de aanname dat de som van de kationen gelijk is aan de som van de anionen. Dit levert namelijk één vergelijking met één onbekende (de Ca-concentratie) die iteratief wordt opgelost met behulp van een Newton Raphson-procedure (de Vries en Kros, 1989). Vervolgens wordt een simulatie uitgevoerd bij het huidige depositieniveau gedurende een zogenaamde "initialisatieperiode". Die is zodanig lang (25 jaar) dat er altijd sprake is van evenwicht tussen de samenstelling van kationen (en anionen) aan het complex en in het bodemvocht met het heersende depositieniveau en de heersende omstandigheden van het betreffende bos-ecosysteem. Op deze wijze wordt voorkomen dat er aanvankelijk (na de initialisatieperiode) sprake is van een onrealistische hoge buffering door kationenuwisseling.

4 INVENTARISATIE EN KWANTIFICERING VAN ONZEKERHEIDSRONNEN

4.1 Afbakening van de studie

Onzekerheid in modeluitkomsten is een gevolg van de onzekerheid in modelstructuur, modelinputs, rand- en/of beginvoorwaarden van modelvariabelen, modelparameters en modeloperatie (par. 2.1).

In het kader van deze studie hebben we ons beperkt tot de effecten van onzekerheden in modelinputs, beginvoorwaarden (initiële condities van modelvariabelen) en modelparameters op de voorspelde waarden van de pH, NO_3 -concentratie, NH_4/K -molratio en Al/Ca -molratio in de wortelzone van een holtpodzolgrond onder Douglasbos (hoofdstuk 1). Onzekerheden als gevolg van de gekozen procesformuleringen (modelstructuur) en de implementatie en numerieke oplossing hiervan (modeloperatie), zijn op dit moment niet in beschouwing genomen. Deze aspecten zullen in toekomstige studies nader worden bekeken.

Voor de gekozen procesformuleringen is in het kader van deze studie gerekend met een stationaire nutriëntenkringloop, waarbij echter wel rekening is gehouden met boomgroei. Dit houdt in dat mineralisatie gelijk is aan bladval en wortelsterfte, terwijl wortelopname de som is van een onderhoudsopname (de som van bladval, wortelsterfte en bladuitloging minus bladopname (de Vries en Kros, 1989)) en een netto opname door toename van het stamvolume. De toename van het takvolume is in het kader van deze studie verwaarloosd. De wortelopname per laag is verder evenredig verondersteld met het wateropnamepatroon (optie a in tabel 2). Er is dus geen sprake van een netto accumulatie van stikstof en zwavel in naalden, wortels en/of in de strooisellaag. Alle zwavel en stikstof die op het bos-ecosysteem terecht komt en niet wordt opgenomen in stammen, spoelt derhalve ook uit voor zover denitrificatie verwaarloosbaar is ("worst-case" scenario). Verder is er

geen sprake van terugkoppeling tussen de afnemende depositie van N en S en afnemende N- en S-gehalten in naalden. Met name voor N kan dit een grote rol spelen (hoofdstuk 5).

4.2 Dataspecificatie

4.2.1 Inleiding

Het model RESAM bevat ca. 95 inputvariabelen, initiële condities en modelparameters. Een overzicht van de benodigde modelinvoer is gegeven in de Vries en Kros (1989). Daarbij moet echter bedacht worden dat voor het bodemcompartiment de variabelen per bodemlaag opgegeven moeten worden. Dit geldt eveneens voor een groot deel van de modelparameters. Uitgaande van gemiddeld ca. 5 bodemlagen (bijv. A0, A1, B2, B3 en C1 horizont) komt dit neer op totaal ca. 215 waarden per bos-ecosysteem waarvan ca. 200 betrekking hebben op de initiële condities en modelparameters. De rest heeft betrekking op modelinputs (depositie).

Bij deze studie is de modeluitvoer beperkt tot de wortelzone wat bij de holtpodzol neerkomt op 4 lagen nl. een A0, A1, B2 en B3 horizont (een strooisellaag en 3 minerale lagen) met laagdikten van respectievelijk 4, 15, 25 en 20 cm. Met het achterwege laten van kalkverwerking en CO₂-evenwichten (zure kalkloze grond) en het veronderstellen van een stationaire nutriëntenkringloop komt het benodigde aantal gegevens voor initiële condities en parameters op ca. 155.

Verder is in het kader van deze studie niet onderzocht wat het effect is van variatie/onzekeerheid in:

- laagdikten;
- hydrologische variabelen (infiltratie, totale wateropname en vochtgehalte per laag);
- gehalten aan Ca, Mg, K en Na in primaire mineralen per laag;

- equivalentfracties van NH_4 , Ca, Mg, K en Na aan het adsorptie-complex per laag;
- omwisselconstanten voor Mg en Na per laag;
- de denitrificatie constante per bodemlaag;
- gehalten aan Mg in stammen, naalden en wortels.

Met uitzondering van laagdikten en hydrologische variabelen zijn dit variabelen en parameters waarvan het effect op de geselecteerde modeluitvoer (pH, NO_3 -concentratie, NH_4 /K-molratio en AL/Ca-molratio) op voorhand verwaarloosbaar te achten is. Zo is het effect van basenverwerking op de elementconcentraties in de bovengrond zeer gering; wordt de initiële kationen bezetting bepaald door de huidige depositie en de heersende processen in het betreffende bos-ecosysteem (par. 3.2); is denitrificatie verwaarloosbaar in de diep ontwaterde holtpodzolgrond, en hebben de overige genoemde parameters en variabelen vooral effect op andere modeluitgangen (bijv. de Mg-concentratie).

Het effect van laagdikte is verwaarloosd vanwege de correlatie hiervan met modelparameters en variabelen. Het effect van de variatie in infiltratie en totale wateropname op de modeluitkomsten is niet meegenomen, omdat dit klimatologische variaties over de jaren zijn en geen variaties die de modeluitkomsten in elk jaar beïnvloeden. Het laatste geldt wel voor het wateropname patroon, en daarmee de waterflux-verdeling, met de diepte die bepaald wordt door de verdeling van de fijne wortels met de diepte. Hiermee is in het kader van deze studie wel rekening gehouden (par. 4.2.3) en als zodanig is het effect van de hydrologie op de modeluitkomsten wel verdisconteerd.

De notatie van de onderzochte variabelen en parameters (ca. 75) is als volgt opgebouwd (zie ook de Vries en Kros, 1989):

<u>Grootheid</u>	<u>Stof</u>	<u>Proces</u>	<u>Compartiment</u>
H = hoeveelheid	N = stikstof	dn = natte depositie	st = stammen
g = gehalte	NH ₄ = ammonium	dd = droge depositie	bl = bladeren
f = fractie	NH ₃ = ammoniak	dv = doorval	wt = wortels
vf = voorkeurs- factor	Ca = calcium	u = uitloging	pm = primaire mineralen
k = snelheids- constante	K = kalium	bv = bladval	ox = oxiden
	Na = natrium	ws = wortelsterfte	ac = adsorptie
	NO ₃ = nitraat	nit = nitrificatie	
K = evenwichts- constante	S = zwavel	den = denitrificatie	complex
		opn = opname	
F = flux		p = protonering	
		v = verwerking	
		omw = omwisseling	
		ads = adsorptie	

Variabelen (initiële condities) hebben betrekking op combinaties met hoeveelheden (H) en gehalten (g), terwijl parameters duiden op combinaties met fracties (f) (met uitzondering van de equivalent-fracties aan het adsorptiecomplex) en constanten (k, K).

Waarden van de eerder genoemde variabelen en parameters per bodemlaag die niet zijn gevarieerd in deze studie, zijn gegeven in tabel 3. Met uitzondering van de strooisellaag zijn deze waarden ook gegeven in de Vries en Kros (1989). Zoals blijkt uit tabel 3 verschillen met name de Ca-bezetting en de gehalten aan primaire mineralen in de strooisellaag sterk van de minerale lagen.

De gebruikte waarden voor de infiltratie en opname van water zijn respectievelijk 0,42 en 0,24 m.jr⁻¹. Voor de Mg-gehalten in stammen, bladeren en wortels zijn de gebruikte waarden resp. 0,01%, 0,07% en 0,06% (de Vries en Kros, 1989).

Tabel 3 Waarden van variabelen en parameters die niet zijn gevarieerd voor het bodemcompartiment.

Variabele/parameter		Laagnr. (horizont)			
		0 (A0)	1 (A1)	2 (B2)	3 (B3)
D	(cm)	4	15	25	20
θ	($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$)	0,20	0,20	0,190	0,19
$g\text{Ca}_{\text{pm}}$	($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	0	20	30	35
$g\text{Mg}_{\text{pm}}$	($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	0	30	45	45
$g\text{K}_{\text{pm}}$	($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	0	180	200	210
$g\text{Na}_{\text{pm}}$	($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	0	120	140	160
$f\text{NH}_{4,\text{ac}}$	(-)	0,09	0,03	0,04	0,05
$f\text{Ca}_{\text{ac}}$	(-)	0,35	0,07	0,04	0,06
$f\text{Mg}_{\text{ac}}$	(-)	0,08	0,02	0,02	0,02
$f\text{K}_{\text{ac}}$	(-)	0,03	0,02	0,02	0,02
$f\text{Na}_{\text{ac}}$	(-)	0,01	0,01	0,02	0,02
$k\text{Mg}_{\text{omw}}$	(-)	0,15	0,30	0,30	0,24
$k\text{Na}_{\text{omw}}$	($\text{mol} \cdot \text{l}^{-1}$) ⁻¹	0,51	0,51	0,51	1,60
k_{den}	(jr^{-1})	0,5	0,5	0,5	0,5

In de volgende subparagrafen worden de kansverdelingen van de onderzochte modelinputs, variabelen en parameters (ca. 75) gekarakteriseerd met behulp van een gemiddelde, standaarddeviatie, minimum, maximum en in de vorm van kansverdeling (bijv. uniform, normaal, lognormaal enz.). Een uniforme verdeling is verondersteld voor alle variabelen en parameters waarvan over de verdeling weinig of niets bekend is. Voor de overige variabelen is op basis van de gegevens gekozen voor een normale of een lognormale verdeling. Tevens is aangegeven in welke mate er sprake is van correlaties tussen parameters en/of variabelen op basis van beschikbare gegevens.

In totaal zijn 250 runs (Monte Carlo-simulaties) uitgevoerd met RESAM om inzicht te krijgen in de onzekerheid van de modeluitkomsten en de bijdrage daaraan door de onzekerheid van de verschillende inputs, variabelen en parameters. Het aantal runs is ca. drie maal zo groot gekozen als het aantal onzekerheidsbronnen, wat voldoende is om redelijke resultaten te verkrijgen (Iman en Helton, 1985).

4.2.2 Kansverdeling van modelinputs

De kwantificering van de onzekerheid in modelinputs (element toevoer via depositie) is gerelateerd aan de ruimtelijke variabiliteit in depositie over een receptorgebied als gevolg van concentratie gradiënten over het gebied en verschillen in efficiëntie ten aanzien van de invang van droge depositie.

Met een receptorgebied is een geografisch vastgelegd emissie-depositie gebied bedoeld, waarbinnen de effecten van emissie-scenario's op bodem, terrestrische en aquatische systemen en gewassen worden doorgerekend. Hiervan zijn er totaal 20 onderscheiden (de Vries et al., 1988). Bij de regionale toepassing van RESAM binnen het DAS-model is het vooralsnog de bedoeling dat gerekend zal worden met een gemiddelde depositie per receptorgebied. Met andere woorden: de ruimtelijke resolutie van de depositiegegevens wordt bepaald door de grootte van een receptorgebied. Het doel van deze studie is onder andere om na te gaan in welke mate de modeluitkomsten worden beïnvloed door de variabiliteit van de depositie binnen een receptorgebied en hoe dit zich verhoudt met de onzekerheid als gevolg van variabiliteit in modelparameters en variabelen.

Bij het kwantificeren van de ruimtelijke variabiliteit in natte en droge depositie over een receptorgebied is gebruik gemaakt van depositie en doorvalgegevens op ca. 35 locaties in intensieve

veehouderij gebieden in Midden- en Zuid-Nederland (Houdijk, 1988; Tiktak et al., 1988; Ivens et al., 1988; Kleijn et al., 1989). In deze gebieden (met name de receptorgebieden 6 (Veluwe), 7 (Achterhoek), 15 (west Noord-Brabant), 16 (midden Noord-Brabant), 17 (noordoost Noord-Brabant) en 18 (zuidoost Noord-Brabant)) kan de variatie in droge depositie van NH_3 en SO_2 op bossen zeer groot zijn.

Een beschrijving van de kansverdeling van de natte depositie op basis van de meetgegevens op bovengenoemde locaties is weer-gegeven in tabel 4.

Tabel 4 Kansverdeling van de natte depositie van SO_4 , NO_3 , NH_4 , Ca, Mg, K, Na en Cl ($\text{mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$).

Input	Distributie type	Gem.	St. dev.	Min.	Max.
$\text{FSO}_{4,\text{dn}}$	normaal	875	225	690	1410
$\text{FNO}_{3,\text{dn}}$	normaal	440	35	370	470
$\text{FNH}_{4,\text{dn}}$	normaal	1310	220	945	1730
FCa_{dn}	normaal	240	125	135	490
FMg_{dn}	normaal	190	65	130	360
FK_{dn}	normaal	240	60	150	340
FNa_{dn}	normaal	730	165	495	970
FCl_{dn}	normaal	1125	315	640	1610

In tabel 4 valt de geringe variabiliteit in NO_3 -depositie op in vergelijking tot SO_4 en NH_4 . Verder valt de hoge depositie van K op in vergelijking tot cijfers van het KNMI/RIVM regenwater-meetnet (Anonymus, 1985). De verklaring voor dit laatste is niet geheel duidelijk.

Een beschrijving van de variabiliteit in de droge depositie is gegeven in tabel 5.

Tabel 5 Kansverdeling van de droge depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 ($\text{mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$) en de droge depositiefraction (f_{dd} , (-)).

Input	Distributie type	Gem.	St. dev.	Min.	Max.
$\text{FSO}_{2,dd}$	normaal	2965	1025	1650	4260
$\text{FNO}_{x,dd}$	normaal	530	230	320	1100
$\text{FNH}_{3,dd}$	normaal	2885	1050	1530	4810
f_{dd}	normaal	0,98	0,55	0,31	1,96

De variabiliteit in de droge depositie in SO_2 , NO_x en NH_3 is gebaseerd op het verschil tussen doorval en natte depositie op de eerder genoemde meetlocaties. Aanvankelijk is getracht om de variatie in de droge depositie van deze stoffen in een willekeurige receptorgebied (noordoost Gelderland) te schatten op basis van de concentratiegradiënt van SO_2 , NO_x en NH_3 over dat gebied, vermenigvuldigd met de geschatte (variabele) depositiesnelheid voor elke stof en gecorrigeerd met factoren, waarmee de extra filtering van droge depositie door bossen wordt verrekend. Deze benadering bleek voor SO_2 echter tot een aanmerkelijk lagere maximale depositieschatting te komen dan die in dit receptor-gebied wordt gemeten middels doorval- en regenwater (Kleijn et al., 1989). Bovendien bleek de aldus geschatte NH_4/SO_4 -verhouding in de totale depositie op equivalentbasis gemiddeld veel groter te zijn dan één, wat samenhangt met de veronderstelde lagere filtering factor voor SO_2 (1,0) dan voor NH_3 (1,7) (Erisman et al., 1987). Uit doorvalgegevens op vrijwel alle meetlocaties in ons land, met uitzondering van de kust, blijkt echter dat deze verhouding ca. 1,0 is (Duijsings, 1986; Houdijk, 1988; Ivens et al., 1988; van Breemen et al., 1988; Tiktak et al., 1988; Kleijn et al., 1989; van Dobben et al., i.v.). Deze discrepantie tussen doorvalgegevens en totale depositie geschat op basis van atmosferische gegevens is reeds eerder in de literatuur naar voren gebracht (Schneider en Bresser, 1988; Ivens, 1989). In het kader van deze studie is uitgegaan van de variabiliteit in doorval-

-gegevens, omdat dit voor SO_2 en NH_3 een goede benadering is voor de totale depositie (Ivens et al., 1988). Tevens kan op basis van deze gegevens de correlatie tussen de depositie van verschillende stoffen worden aangegeven.

Uit tabel 5 blijkt dat de gemiddelde droge depositie van SO_2 en NH_3 vrijwel gelijk is en dat de variabiliteit van dezelfde orde van grootte is. De variatie in de NO_x depositie is veel geringer. Dit hangt samen met de uniforme NO_x concentratie over een gebied. Hetzelfde geldt voor SO_2 maar hier zorgen de grote concentratieverschillen in NH_3 voor de variatie in depositie, omdat beide stoffen co-precipiteren (Adema et al., 1986).

De droge depositie van Ca, Mg, K, Na en Cl wordt in RESAM berekend als een fractie van de natte depositie (de Vries en Kros, 1989). De verdeling van de droge depositiefractie (f_{dd}) is eveneens gegeven in tabel 5. De verdeling van f_{dd} is gebaseerd op het verschil in doorval (FNa_{dv}) en natte (bulk, FNa_{dn}) depositie van Na op de genoemde lokaties volgens:

$$f_{dd} = \frac{\text{FNa}_{dv} - \text{FNa}_{dn}}{\text{FNa}_{dn}} \quad (17)$$

Hieraan ligt de aanname ten grondslag dat bij Na geen sprake is van kronendakinteracties middels bladuitloging (Ulrich, 1983; Bredemeier, 1988). Voor Cl geldt hetzelfde en de f_{dd} waarden gebaseerd op Cl in doorval en depositie waren dan ook vrijwel gelijk aan die voor Na. Bij Ca, Mg en K is echter wel sprake van bladuitloging die voor deze stoffen is berekend uit het verschil in doorval enerzijds, en natte (bulk) depositie plus de berekende droge depositie anderzijds (par. 4.2.4). Uit tabel 5 blijkt dat de droge depositie van basen (Ca, Mg, K en Na) en Cl gemiddeld gelijk is aan de natte depositie.

Voor alle droge depositiegegevens is uitgegaan van een normale verdeling. Voor de $FNO_{x,dd}$ en f_{dd} is dit echter niet geheel juist. Hier is sprake van een scheve verdeling, zoals valt af te leiden uit het feit dat de gemiddelde waarden dicht bij het minimum dan bij het maximum liggen. Door de definiëring van een minimum en maximum komen de data die PRISM uit de opgegeven verdeling trekt, echter redelijk overeen met de oorspronkelijke, enigszins scheve, verdeling.

Met de onzekerheid in een scenario, waarmee de beoogde reductie in de depositie wordt beschreven, is geen rekening gehouden. Hierbij is sprake van politieke factoren die de realisering van de gewenste emissiereducties (en daarmee depositiereducties) beïnvloeden en deze zijn bewust buiten beschouwing gelaten. Bij elke Monte Carlo-simulatie (in totaal 250) zijn, op de aselekt (via Latin Hypercube Sampling) getrokken startwaarden voor de droge en natte depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 , vaste reductiefracties gezet die gebaseerd zijn op de beoogde landelijke reducties in de periode 1987 tot 2010. Daarbij is gerekend dat uitgaande van het landelijk gemiddelde in 1987 (Schneider en Bresser, 1988), een zodanige reductie plaatsvindt dat de depositiedoelstellingen van $2400 \text{ mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ en $1400 \text{ mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ in respectievelijk 2000 en 2010 worden gehaald. De samenstelling van de depositie op deze tijdstippen is gegeven in tabel 6.

Tabel 6 Gebruikte waarden voor gemiddelde totale depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 ($\text{mol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$) in 1987, 2000 en 2010 in Nederland.

Jaar	SO_2	NO_x	NH_3	Totaal
1987	2160	1570	1540	5270
2000	800	950	650	2400
2010	340	670	390	1400

De waarden voor 2000 en 2010 zijn berekend op basis van de emissies van SO_2 , NO_x en NH_3 in Nederland, België, West-Duitsland, Frankrijk en Groot-Brittannië in 1980, de gewenste reducties hiervan op de beide tijdstippen en de relatie tussen depositie in Nederland en emissie in genoemde landen (Schneider en Bresser, 1988).

De reductie in de depositie van SO_2 , NO_x en NH_3 is zowel in de periode 1987-2000 als in de periode 2000-2010 lineair verondersteld. De gebruikte reductiefracties (fracties waarmee de depositie wordt gereduceerd), zijn gegeven in tabel 7. De waarden zijn gebaseerd op de gegevens in tabel 6. De fracties zijn voor natte en droge depositie gelijk verondersteld.

*Tabel 7 Gebruikte reductiefracties voor
 SO_2 , NO_x en NH_3 in de periode
tussen 1987 en 2010.*

Periode	SO_2	NO_x	NH_3
1987-2000	0,63	0,40	0,58
2000-2010	0,58	0,29	0,40

4.2.3 Kansverdeling van variabelen

4.2.3.1 Boomcompartimenten

Variabelen met betrekking tot het boomcompartiment betreffen de biomassa van stammen, takken, bladeren (naalden) en wortels, en de elementgehalten hierin. De karakterisering van de verdeling hiervan is gegeven in tabel 8. Voor de takken zijn geen waarden gegeven, omdat de bijgroei van de takken in deze studie is verwaarloosd (zie par. 4.1).

Tabel 8 Kansverdeling van variabelen voor de boomcompartimenten

Variabele	Distributie type	Gem.	St. dev.	Min.	Max.
H_{bl} (kg.ha ⁻¹)	normaal	9500	3135	3400	16000
H_{wt} (kg.ha ⁻¹)	uniform	3750	-	1350	6300
f_{wt1} (-)	normaal	0,39	0,13	0,06	0,66
f_{wt2} (-)	normaal	0,41	0,12	0,04	0,78
gN_{st} (%)	normaal	0,11	0,015	0,08	0,12
gCa_{st} (%)	normaal	0,07	0,035	0,04	0,13
gK_{st} (%)	normaal	0,04	0,016	0,02	0,07
gS_{st} (%)	normaal	0,02	0,008	0,01	0,04
gN_{bl} (%)	normaal	2,80	0,59	1,49	3,71
gCa_{bl} (%)	normaal	0,32	0,14	0,13	0,79
gK_{bl} (%)	normaal	0,36	0,08	0,20	0,66
gS_{bl} (%)	normaal	0,24	0,05	0,17	0,36
gN_{wt} (%)	normaal	0,34	0,05	0,25	0,40
gCa_{wt} (%)	normaal	0,25	0,07	0,16	0,34
gK_{wt} (%)	normaal	0,22	0,07	0,13	0,44
gS_{wt} (%)	normaal	0,05	0,01	0,03	0,07

De gegevens van de hoeveelheid naalden en de gehalten in stammen en wortels zijn gebaseerd op literatuuronderzoek (o.a. Kimmins et al., 1985), terwijl de overige gegevens (naaldgehalten en wortel-massa met de verdeling daarvan met de diepte) gebaseerd zijn op een veldonderzoek naar de relatie tussen bodemvochtsamenstelling en bosvitaliteit voor een achttal Douglasopstanden (Oterdoom et al., 1990). In dit verband is het belangrijk om op te merken dat de N-gehalten in de naalden excessief hoog zijn, wat samenhangt met de hoge NH_4 -input op deze locaties (Kleijn et al., 1989). Het is waarschijnlijk dat de N-gehalten dalen bij een reducerend

depositieniveau (van de Burg en Kievit, 1989), maar hiermee is in deze studie geen rekening gehouden (zie par. 4.1).

Een ander relevant aspect is het feit dat de totale wortelmassa (H_{wt}) en de verdeling hiervan met de diepte (f_{wt}) beperkt is tot de minerale lagen (de lagen 1, 2 en 3 dat wil zeggen de A1, B2 en B3 horizont). In het genoemde veldonderzoek is de fijne wortelmassa in de strooisellaag niet bepaald, maar het is zeer waarschijnlijk dat hier een vrij groot deel van de fijne wortels voorkomt. Bij de Monte Carlo-simulaties zijn de wortelfracties zodanig getrokken dat de som van de drie fracties gelijk is aan 1. Door de sterk negatieve correlatie tussen f_{wt1} en f_{wt2} (zie par. 4.2.5) bleek de som van beide fracties nooit hoger te zijn dan 1. De waarde van f_{wt3} is vervolgens berekend volgens $1 - f_{wt1} - f_{wt2}$. De verdeling van f_{wt3} is derhalve niet gegeven in tabel 8. De aldus getrokken verdelingen bleken goed overeen te komen met de oorspronkelijk opgegeven verdeling.

Met uitzondering van de variatie in fijne wortelmassa, is voor alle gegevens uitgegaan van een normale verdeling. De keuze voor een normale verdeling is echter veelal slechts een aanname gebaseerd op een gering aantal gegevens.

4.2.3.2 Bodemcompartimenten

Variabelen voor de bodemcompartimenten zijn: de laagdichtheid (ρ), het gehalte aan Al in oxiden (gAl_{ox} , oxalaat geëxtraheerd Al), de sulfaat sorptie capaciteit (SSC), de kationen omwisselcapaciteit (CEC), het organische stofgehalte (OS) en de equivalentfractie van Al aan het adsorptiecomplex. Gegevens zijn weergegeven in tabel 9.

Tabel 9 Kansverdeling van variabelen voor de bodemcompartimenten.

Variabele	Laag	Distributie type	Gem.	St. dev.	Minimum	Maximum
$\rho^{*})$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	0(A0)	normaal	150	60	22	454
CEC ($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	0(A0)	normaal	282	68	108	700
$\text{OS}^{*})$ (%)	1(A1)	lognormaal	1,39 (4,01) ^{#)}	0,74	-1,20 (0,30)	3,20 (24,50)
	2(B2)	lognormaal	0,44 (1,55)	0,73	-1,20 (0,00)	1,72 (5,60)
	3(B3)	lognormaal	0,40 (0,67)	0,76	-2,30 (0,00)	0,92 (2,50)
gAl_{ox} ($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	1(A1)	lognormaal	4,18 (65)	0,66	2,46 (12)	5,21 (184)
	2(B2)	lognormaal	5,11 (165)	0,61	2,95 (19)	6,65 (777)
	3(B3)	lognormaal	4,98 (145)	0,41	3,77 (42)	6,01 (406)
fAl_{ac} (-)	0(A0)	normaal	0,05	0,03	0,02	0,11
	1(A1)	normaal	0,53	0,15	0,37	0,78
	2(B2)	normaal	0,73	0,15	0,52	0,89
	3(B3)	normaal	0,74	0,11	0,51	0,93

*) Waarden van dichtheid (ρ) en CEC van minerale lagen zijn berekend via een vertaalfunctie met organische stof.

#) Vermeld zijn de natuurlijke logaritmen (ln-waarden) die in PRISM zijn ingevoerd en die normaal verdeeld zijn. Voor het gemiddelde, minimum en maximum is tussen haakjes de bijbehorende reële waarde vermeld.

Gegevens over de verdeling van de laagdichtheid en de CEC van de strooisellaag (A0) zijn afkomstig van veldonderzoek in de genoemde acht Douglasopstanden (Kleijn et al., 1989). Voor de minerale lagen (A1, B2 en B3) zijn laagdichtheid en CEC gebaseerd op een vertaalfunctie met organische stof (resp. Hoekstra en Poelman, 1982 voor de dichtheid en Kleijn et al., 1989 voor de CEC). Organische-stofgegevens zijn geselecteerd uit het Bodemkundig Informatie Systeem (BIS) van het Staring Centrum. De gebruikte vertaalfuncties zijn:

$$\rho = \frac{1}{a_0 + a_1 \text{ OS}} \quad (18)$$

$$\text{CEC} = a_2 \text{ OS} \quad (19)$$

De waarden voor a_0 en a_1 zijn per laag gevarieerd zoals aangegeven in tabel 10 (Hoekstra en Poelman, 1982).

*Tabel 10 Waarden voor a_0 en a_1 in de
vertaalfunctie tussen laagdicht-
heid en organische-stofgehalten*

Laag	Horizont	a_0	a_1
1	A1	0,646	0,025
2	B2	0,651	0,021
3	B3	0,626	0,030

De gebruikte waarde voor a_2 is 7,6 ongeacht de bodemlaag (horizont) (Kleijn et al., 1989).

De toepassing van de hierboven genoemde vertaalfuncties (vergelijking (18) en (19) impliceert dat er in het model een functioneel verband tussen de dichtheid (ρ) en de CEC bestaat.

SSC-gegevens zijn eveneens gebaseerd op een vertaalfunctie en wel met het Al-oxalaatgehalte. Op basis van gegevens in Johnson en Todd (1983) volgens:

$$SSC = a_3 \text{ gAl}_{\text{ox}} \quad (20)$$

met a_3 is 0,02 ongeacht de horizont.

Evenals het organische-stofgehalte zijn Al_{ox} -waarden geselecteerd uit het BIS.

De equivalentfracties van Al aan het adsorptiecomplex zijn voor de minerale lagen afgeleid uit veldonderzoek (Kleijn et al., 1989). De waarde van de H-bezetting is berekend volgens $1 - f\text{Al}_{\text{ac}} - f\text{NH}_{4,\text{ac}} - f\text{Ca}_{\text{ac}} - f\text{Mg}_{\text{ac}} - f\text{K}_{\text{ac}} - f\text{Na}_{\text{ac}}$ waarbij alleen $f\text{Al}_{\text{ac}}$ stochastisch is (tabel 9), terwijl de overige fracties constant zijn gehouden (tabel 3).

Om enig inzicht te hebben in de orde van grootte van de laag-dichtheid, SSC en CEC is in tabel 11 een beschrijving van de kansverdeling van deze variabelen in de minerale lagen gegeven op basis van organische-stof en Al_{ox} -gegevens in het BIS (tabel 9) en de bovengenoemde vertaalfuncties.

4.2.4 Kansverdeling van parameters

4.2.4.1 Boomcompartimenten

Parameters met betrekking tot het boomcompartiment betreffen constanten voor blad- en wortelopname, bladuitloging, bladval en wortelsterfte. Een karakterisering van de distributie hiervan is gegeven in tabel 12.

*Tabel 11 Kansverdeling van de laagdichtheid (ρ), SSC en CEC
in de minerale lagen van een holtpodzolgrond.*

Variabele	Laag	Ditributie type	Gem.	St. dev.	Min.	Max.
ρ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	1 (A1)	normaal	1310	139	790	1530
	2 (B2)	normaal	1450	48	1300	1540
	3 (B3)	normaal	1540	35	1300	1600
SSC ($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	1 (A1)	lognormaal ¹⁾	0,3 (1,3)	0,5	-1,4 (0,3)	1,3 (3,7)
	2 (B2)	lognormaal	1,2 (3,3)	0,5	-7,0 (0,0)	2,7 (15,5)
	3 (B3)	lognormaal	1,1 (2,9)	0,3	-7,0 (0,0)	2,1 (8,1)
CEC ($\text{mmol}_c \cdot \text{kg}^{-1}$)	1 (A1)	lognormaal	3,4 (30,0)	0,7	0,7 (2,0)	5,2 (186)
	2 (B2)	lognormaal	2,4 (11,1)	0,7	0,0 (1,0)	3,8 (43,0)
	3 (B3)	lognormaal	1,6 (4,8)	0,7	0,0 (1,0)	2,9 (19,0)

1) De waarden van SSC en CEC zijn lognormaal verdeeld, omdat gAl_{ox} resp. OS lognormaal zijn verdeeld.

Tabel 12 Kansverdeling van parameters voor boomcompartimenten.

Parameter	Distributie type	Gem.	St. dev.	Min.	Max.
$\text{fNH}_{3,\text{opn},\text{bl}} (-)$	uniform	0,1	-	0,0	0,2
$\text{vfNH}_{4,\text{opn}} (-)$	uniform	1,5	-	1,0	2,0
kCa_u (jr^{-1})	normaal	0,14	0,05	0,08	0,23
kMg_u (jr^{-1})	normaal	0,26	0,04	0,19	0,31
kK_u (jr^{-1})	normaal	0,22	0,08	0,09	0,32
k_{bv} (jr^{-1})	normaal	0,28	0,08	0,20	0,80
k_{ws} (jr^{-1})	uniform	2,0	-	1,5	2,5

De waarden voor bladopname van NH_3 ($f\text{NH}_{3,\text{opn},\text{bl}}$) en de voorkeursfactor voor NH_4 -opname ($vf\text{NH}_{4,\text{opn}}$) door de wortels zijn arbitrair. Met betrekking tot bladopname van NH_3 zijn gegevens beschikbaar van kortdurende experimenten (Booy et al., 1987), maar extrapolatie hiervan leidt tot niet realistische schattingen van $f\text{NH}_{3,\text{opn},\text{bl}}$. Bladopname van SO_2 en NO_x is verwaarloosbaar geacht. De waarden voor bladuitloging zijn herleid uit de verschillen in doorval en natte depositie en geschatte droge depositie van Ca, Mg en K onder een vijftiental Douglasopstanden (Houdijk, 1988; Tiktak et al., 1988; Kleijn et al., 1989) en een schatting van de voorraad van deze nutriënten in naalden (par. 4.2.2) volgens:

$$kX_u = \frac{FX_{dv} - (1 + f_{dd}) FX_{dn}}{HX_{bl}} \quad (21)$$

met $X = \text{Ca, Mg, K}$

Gegevens over de blad(naald)valconstante (k_{bv}) zijn gebaseerd op het naaldverlies (de naaldbezetting) van Douglasbomen die geanalyseerd zijn in het kader van de landelijke vitaliteitsinventarisatie van Staatsbosbeheer voor de periode 1985 tot 1987 (van der Tweel, pers. med.). De blad(naald)val constante is daarbij omgekeerd evenredig verondersteld aan de naaldbezetting. De wortelsterfte-constante is afgeleid uit literatuurgegevens (Santantonio en Hermann, 1985).

Met uitzondering van de bladvalconstante is voor alle parameters uitgegaan van een uniforme verdeling. Voor k_{bv} is een normale verdeling aangehouden hoewel hier een lognormale verdeling waarschijnlijk juist is.

4.2.4.2 Bodemcompartimenten

Parameters met betrekking tot het bodemcompartiment zijn: constanten voor nitrificatie, protonering, silicaat- en hydroxide-verwerking, kationenomwisseling en sulfaatadsorptie. De distributie hiervan is gegeven in tabel 13.

Referentiewaarden voor de nitrificatie constante zijn geijkt op literatuurgegevens over het optreden van nitrificatie in resp. de strooisellaag (ca. 50%) en minerale lagen (ca. 45%) (Stams, 1988; Tietema en Verstraten, 1988). Hetzelfde geldt voor de protoneringsconstante en de Al-hydroxideverweringsconstante die geijkt zijn op de gemiddeld jaarlijkse RCOO-flux en Al-flux in podzolprofielen (Mulder, 1988). Bij de ijking is de waarde van k_{nit} en $k_{\text{Al}_{\text{v,ox}}}$ gevarieerd met de diepte, maar van k_{prot} niet. De reden hiervoor is dat voor de eerste twee parameters een verklaring gegeven kan worden voor het effect van de bodemlaag. In geval van nitrificatie (k_{nit}) betreft dit een afnemende microbiële activiteit met de diepte. In geval van Al-verwerking uit hydroxiden ($k_{\text{Al}_{\text{v,ox}}}$) betreft dit verschillen in de Al-hydroxide vorm afhankelijk van de bodemhorizont. Zo is de verwerings-snelheid van Al-hydroxiden in een uitgeloogde A-horizont veel geringer dan in een B2-horizont. Voor k_{prot} kan een soortgelijke verklaring echter niet gegeven worden.

Het oplosbaarheidsprodukt van Al-hydroxide (K_{gibb}) is gebaseerd op literatuurinformatie (Lindsay, 1979; May et al., 1979). Gegevens voor de basenverweringsconstanten zijn afgeleid uit informatie over de basenvoorraad en de basenverwerking (de Vries en Breeuwsma, 1986).

Waarden voor de omwisselconstanten zijn gebaseerd op de kationen bezetting en de gemiddelde jaarlijkse bodemvochtsamenstelling in holtpodzolgronden onder een tweetal Douglasopstanden (Kleijn et al., 1989). De variatie in de sulfaatadsorptieconstante is gebaseerd op literatuurgegevens (Cosby et al., 1986).

Tabel 13 Kansverdeling van parameters voor de bodemcompartimenten.

Parameter	Laag	Distributie type	Gen.	St. dev.	Minimum	Maximum
k_{nit} (jr^{-1})	0	uniform	85	-	50	120
	1	uniform	20	-	10	30
	2	uniform	2	-	0	5
	3	uniform	2	-	0	5
k_p (jr^{-1})	-	uniform	50	-	25	75
$k_{K,Na_{v,pm}}$ (jr^{-1})	-	uniform	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-4}$
$k_{Ca,Mg_{v,pm}}$ (jr^{-1})	-	uniform	$5,25 \cdot 10^{-4}$	-	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-3}$
$k_{Al_{v,ox}}$ (jr^{-1})	1	uniform	0,02	-	0,01	0,03
	2	uniform	0,20	-	0,10	0,30
	3	uniform	0,20	-	0,10	0,30
K_{gibb1} ($mol \cdot l^{-1}$) ⁻²	-	uniform	$10^{8,77}$	-	$10^{8,11}$	$10^{9,35}$
KH_{omw} ($mol \cdot l^{-1}$) ⁻¹	0	lognormaal	3,50 (33)*	1,00	1,50 (4,5)	5,50 (2,45)
	1	lognormaal	6,79 (889)	1,29	4,76 (117)	9,19 (9800)
	2	lognormaal	7,83 (2515)	1,96	4,01 (55)	10,39 (32533)
	3	lognormaal	7,72 (2252)	3,52	2,62 (14)	12,20 (198789)
$KA1_{omw}$ ($mol \cdot l^{-1}$)	0	lognormaal	4,30 (74)	1,00	2,30 (10)	6,30 (545)
	1	lognormaal	-1,18 (0,31)	1,32	-2,98 (0,05)	0,95 (2,59)
	2	lognormaal	-0,18 (0,84)	1,38	-2,19 (0,11)	1,62 (5,11)
	3	lognormaal	-0,14 (0,87)	1,44	-1,80 (0,17)	2,74 (5,1)
$KNH_{4,omw}$ ($mol \cdot l^{-1}$) ⁻¹	0	lognormaal	1,40 (4,1)	0,20	1,00 (2,71)	1,80 (6,0)
	1	lognormaal	1,69 (5,4)	1,33	-0,57 (0,57)	3,58 (36)
	2	lognormaal	5,23 (187)	1,91	1,64 (5,2)	8,06 (3165)
	3	lognormaal	7,62 (2039)	1,93	4,79 (120)	10,68 (43478)
KK_{omw} ($mol \cdot l^{-1}$) ⁻¹	1	lognormaal	2,50 (12)	0,70	1,10 (275)	3,90 (49)
	1	lognormaal	3,60 (37)	0,69	2,40 (11)	4,45 (86)
	2	lognormaal	4,77 (118)	0,63	3,61 (37)	5,53 (252)
	3	lognormaal	6,17 (478)	0,87	5,02 (151)	7,48 (1772)
$kSO_{4,ads}$ ($m^3 \cdot mol_c$)	-	lognormaal	0,00 (1,0)	1,15	-2,30 (0,1)	2,30 (10)

*) In de tabel zijn de ln-waarden gegeven, die in PRISM zijn ingevoerd welke normaal verdeeld zijn. Tussen haakjes is bij het gemiddelde, minimum en maximum de desbetreffende reële waarde vermeld.

Met uitzondering van de omwisselconstanten is voor alle parameters uitgegaan van een uniforme verdeling, omdat er onvoldoende informatie beschikbaar was om voorkeur voor een bepaalde verdeling aan te geven. Voor de nitrificatie, Al-verwerings- en protoneringsconstante zijn zelfs de aangegeven ranges (minima en maxima) slechts arbitraire schattingen die duidelijk lognormaal verdeeld bleken te zijn.

4.2.5 Correlaties

Verschillende inputs, parameters en variabelen zijn onderling gecorreleerd. Dit geldt met name voor de depositie van een aantal stoffen, parameters en variabelen die de turnover van bladeren (naalden) en wortels bepalen en omwisselconstanten. Onderlinge correlaties die ingevoerd zijn in PRISM, zijn gegeven in tabel 14.

Tabel 14 Ingebrachte correlaties.

"Parameter"1*)	"Parameter"2	Correlatie-coëfficiënt
FSO _{2,dd}	FNO _{x,dd}	0,77
FSO _{2,dd}	FNH _{3,dd}	0,89
FNO _{x,dd}	FNH _{3,dd}	0,51
FCI _{dn}	FNa _{dn}	0,80
k _{bv}	H _{bl}	-0,8
k _{ws}	H _{wt}	-0,6
f _{wt1}	f _{wt2}	-0,67
KH _{omw}	KAl _{omw}	0,52
KK _{omw}	KNH _{4,omw}	0,76

*) "Parameter" 1/2 is hier een omvattend begrip voor inputs, parameters en variabelen.

Correlaties zijn alleen ingevoerd als er duidelijke aanwijzingen waren op basis van beschikbare gegevens. Daarbij is een ondergrens van 0,5 aangehouden voor de correlatie-coëfficiënt.

Uit tabel 14 blijkt dat met name de droge depositie van SO_2 en NH_3 sterk gecorreleerd zijn, overeenkomstig de verwachting (par. 4.2.2). Voor SO_2 en NO_x geldt dit in mindere mate en voor NO_x en NH_3 is de relatie vrij zwak. Overigens kan dit nog samenhangen met nitrificatie in het kronendak, aangezien de correlaties gebaseerd zijn op het verschil in elementtoevoer via doorval en regenwater.

In de natte depositie bleken de correlatie-coëfficiënten kleiner dan 0,5 te zijn met uitzondering van Na en Cl die voornamelijk afkomstig zijn uit zeezout. Deze stoffen zijn ook sterk gecorreleerd in de droge depositie, welke in RESAM beschreven als een functie van de natte depositie (zie par. 4.2.2).

De correlatie tussen de bladvalconstante (k_{bv}) en de bladmassa (H_{bl}) is gebaseerd op de overweging dat naarmate de bladmassa groter is, het gemiddelde aantal naaldjaargangen zal toenemen, wat neerkomt op een lagere bladvalconstante. Het produkt van k_{bv} en H_{bl} (de jaarlijkse bladvalflux) zal in het algemeen variëren tussen ca. 1 tot 4 ton $\text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ (Kimmins et al., 1985; Tiktak et al., 1988). Het gebruik van ongecorreleerde waarden kan echter leiden tot een variatie van 0,7 tot 12,8 ton $\text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ (vergelijk tabel 8 en 12). Derhalve is een correlatie tussen k_{bv} en H_{bl} van -0,8 verondersteld. Dit resulteert in een produkt van k_{bv} en H_{bl} tussen 1,3 en 4 ton ha^{-1} (fig. 4).

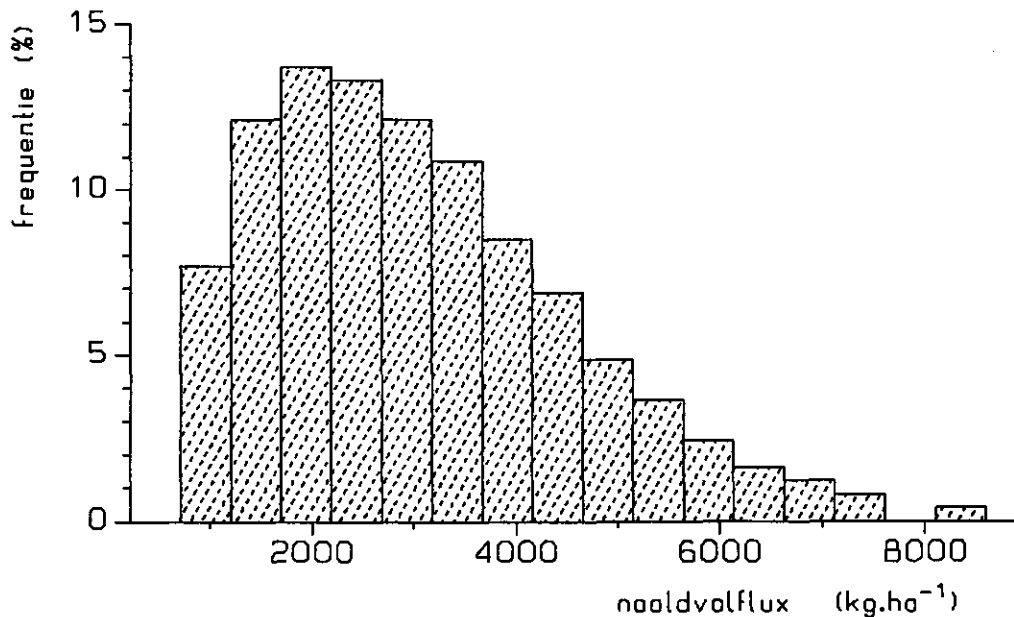


Fig. 4 Onzekerheid in de naaldvalflux bij de veronderstelde ranges en correlatie tussen in naaldvalconstante en naaldmassa.

Op basis van een soortgelijke overweging is de correlatie tussen de wortelsterfte-constante en de wortelmassa op -0,6 gesteld. Tevens is in dit kader een correlatie ingevoerd tussen de (fijne) wortelmassa in de eerste en tweede laag die gebaseerd is op beschikbare veldgegevens hierover (Oterdoom et al., i.v.). Er is overigens ook sprake van een correlatie tussen de wortelmassa in de tweede en derde laag, maar die komt automatisch tot stand in de trekkingsprocedure, omdat de som van de drie wortelfracties gelijk is aan één (zie par. 4.2.3.1).

Tenslotte is er duidelijk sprake van correlatie tussen de omwisselconstanten. Dit geldt met name voor H en Al die tezamen ca. 90% van de complexbezetting uitmaken. Verder is er een correlatie tussen de K- en NH_4 -omwisselconstante, wat wijst op een vergelijkbaar adsorptie mechanisme voor beide stoffen. Op basis van de beschikbare gegevens uit het genoemde veldonderzoek in Douglas-

opstanden is de correlatie tussen deze omwisselconstanten voor alle lagen op 0,52 resp. 0,76 gesteld.

Correlaties tussen CEC, dichtheid en Al_{ox} -gehalten in de afzonderlijke lagen zijn wel waarschijnlijk, maar dit is voornog niet verondersteld, omdat hierover op dit moment te weinig gegevens beschikbaar zijn.

5 RESULTATEN EN DISCUSSIE

Resultaten van de onzekerheidsanalyse op het bodemverzuringmodel RESAM hebben betrekking op de onzekerheid in modeluitkomsten (par. 5.1) en de bijdrage van de verschillende inputs, parameters en variabelen aan die onzekerheid (par. 5.2). De bespreking is beperkt tot laag 1 (A0, 0-15 cm, bovenkant wortelzone) en laag 3 (B3, 40-60 cm, onderkant wortelzone) van de holtpodzolgrond.

Omwille van de leesbaarheid heeft het begrip parameter meestal betrekking op modelinputs, parameters en variabelen afhankelijk van de toegepaste modelgrootheid.

5.1 Onzekerheid in modeluitkomsten

Achtereenvolgens wordt de onzekerheid in pH, NO_3 -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca -molratio in laag 1 en 3 besproken op basis van:

- het verloop van gemiddelde, mediaan (d.i. 50 percentiel), 97,5 en 2,5 percentiel waarden in de tijd (1987-2010);
- gemiddelde, standaarddeviatie en variatie coëfficiënt (= st. dev./gem.) aan het begin (1987), halverwege (2000) en aan het eind (2010) van de simulatie-periode;
- histogrammen op de tijdstippen 1987 en 2010.

Tevens is het resultaat gegeven van een simulatie die uitgevoerd is met gemiddelde parameter-instellingen om na te gaan in hoeverre de modeluitkomsten van een dergelijke simulatie overeenkomen met het gemiddelde van alle Monte Carlo-simulatie uitkomsten. Hiermee kan worden nagegaan of bij een later uit te voeren regionale toepassing op nationale schaal volstaan kan worden met simulaties met gemiddelde parameter-instellingen, hierna aangeduid met referentie-run.

Bij de weergave van resultaten in tabellen en histogrammen is gekozen voor de jaren 1987, 2000 en 2010, aangezien deze tijdstippen de veranderingen in het depositieniveau gedurende de simulatie-periode (1987-2010) markeren (zie tabel 6).

Om na te gaan in hoeverre de variatie in modeluitkomsten reëel is, is tenslotte een vergelijking gemaakt met veldwaarnemingen in 1987 (Kleijn et al., 1989). De vergelijking is alleen gemaakt voor de modeluitkomsten aan het begin van de simulatie-periode, aangezien de depositie dan redelijk vergelijkbaar is.

Met behulp van deze veldgegevens kan worden nagegaan of de gesimuleerde onzekerheid in modeluitkomsten niet te groot of te klein is. In het geval van een te grote onzekerheid kan de onzekerheid worden gereduceerd door o.a. die simulatieruns te verwerpen, waarvan de modeluitkomst buiten de range van de veldgegevens valt (par. 2.1). In het geval van een te kleine onzekerheid kan dit een aanleiding zijn om de onzekerheid in de gecalibreerde parameters te vergroten.

De vergelijking tussen modeluitkomsten en veldwaarnemingen is overigens beperkt tot de NH_4/K - en de Al/Ca -molratio, omdat het bij de veldwaarnemingen gaat om gemiddelde waarden van metingen per bodemlaag die éénmaal per seizoen verricht zijn (4 maal per jaar). Er kan dus niet gesproken worden van flux gemiddelde jaarlijkse concentraties. Vanwege de extreem hoge concentraties (en lage fluxen) in de zomerperiode zijn gemiddelde concentraties berekend de aan de hand van veldgegevens duidelijk hoger dan de fluxgemiddelde concentraties op jaarbasis. Vergelijking aan de modelsimulaties met H^+ (pH) en NO_3 -concentraties is derhalve weinig zinvol. In het geval van molratio's geldt echter dat het seizoenseffect sterk gereduceerd wordt, omdat de seizoensvariatie in de NH_4 - en K-concentraties een redelijk gelijke tred vertonen. Dit maakt dat de spreiding in de veldwaarnemingen (qua ruimte schaal) in de gemiddelde (qua tijdschaal) NH_4/K -molratio's per bodemlaag als een benadering voor de spreiding in de flux

gemiddelde jaarlijkse molratio's gebruikt kan worden. Daarbij moet echter wel bedacht worden dat bij de veldwaarnemingen sprake is van een beperktere spreiding in depositie waarden en in waarden van bodemvariabelen zoals de CEC en het Al-hydroxide-gehalte. Ondanks dat er in het veldonderzoek sprake is van 4 bodemtypen blijkt de spreiding (op landelijke schaal) voor genoemde variabelen in de acht opstanden geringer dan de maximale spreiding die binnen één bodemtype (de holtpodzol) kan worden aangetroffen. Verder is het aantal gemiddelde veldwaarnemingen (40) een stuk lager dan het aantal modeluitkomsten (250).

5.1.1 pH

In fig. 5 is het verloop van de pH in laag 1 en laag 3 weergegeven voor het gemiddelde, diverse percentielwaarden en een simulatie met gemiddelde parameter-instellingen.

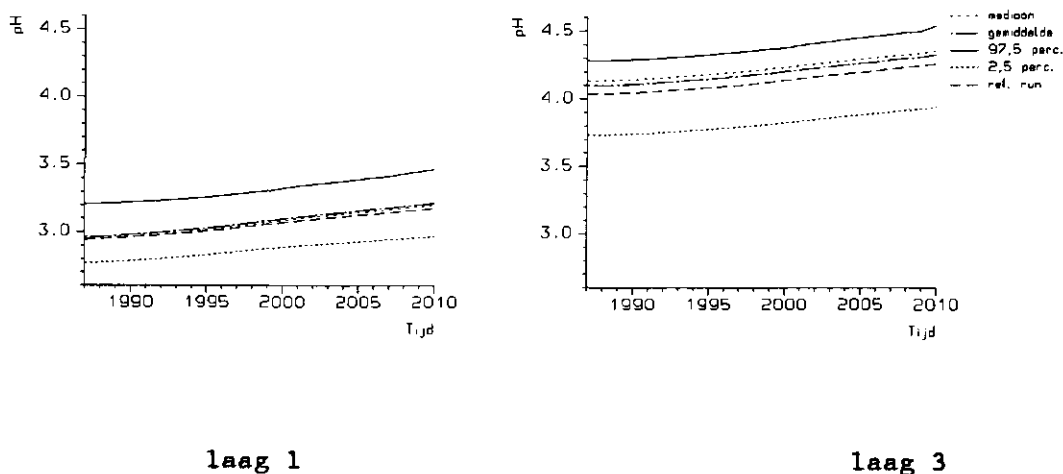


Fig. 5 Verloop van de pH in de tijd in laag 1 en laag 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run.

Uit fig. 5 blijkt dat de onzekerheid in de pH in de ondergrond absoluut gezien iets groter is dan in de bovengrond. Dit hangt samen met de wijze waarop de pH-buffering in RESAM is beschreven. In de ondergrond is er sprake van evenwicht met Al-hydroxide, terwijl er in de bovengrond een bepaalde mate van onderverzadiging is (de Vries en Kros, 1989). Dit betekent dat de onzekerheid in de pH in de ondergrond voor een belangrijk deel wordt bepaald door de parameter die het oplosbaarheidsproduct van Al-hydroxide beïnvloedt (K_{gibb}), terwijl de onzekerheid in de pH in de bovengrond bepaald wordt door parameters die de verwerings/oplossingskinetiek van Al-hydroxide beïnvloeden (met name $g\text{Al}_{\text{ox}}$ en $k\text{Al}_{\text{v,ox}}$) (par. 5.2.2.1).

Wanneer de hier gepresenteerde simulaties vergeleken worden met reeds eerder beschreven simulaties (de Vries en Kros, 1989) blijkt dat de pH in laag 1 lager uitvalt. Dit wordt met name veroorzaakt doordat in de Vries en Kros (1989) de waarde van van $k\text{Al}_{\text{v,ox}}$ gecalibreerd is op de Al-flux in een "lemige" bosgrond (Hackfort; van Breemen et al., 1988) terwijl de hier gebruikte waarde van $k\text{Al}_{\text{v,ox}}$ gecalibreerd is op Al-fluxen in een veldpodzol (Tongbersven en Hasselsven; Mulder, 1988). Dit resulteert in een lagere buffering in de bovengrond en daarmee een lagere pH.

Uit fig. 5 blijkt verder dat de pH zowel in laag 1 als in laag 3 toeneemt in de tijd als gevolg van het dalende depositie-scenario. De onzekerheid in de pH blijft gedurende de simulatieperiode min of meer constant in beide lagen.

Een vergelijking tussen de simulatie met gemiddelde parameter-instellingen (referentie-run) en het gemiddelde van de Monte Carlo-simulatie laat zien dat deze redelijk met elkaar overeenkomen, zij het dat de referentie-run over de gehele simulatieperiode ca. 0,01 tot 0,05 pH lager ligt.

De pH-stijging in de tijd en de constante mate van onzekerheid zijn tevens geïllustreerd in tabel 15, waarin de gemiddelde pH

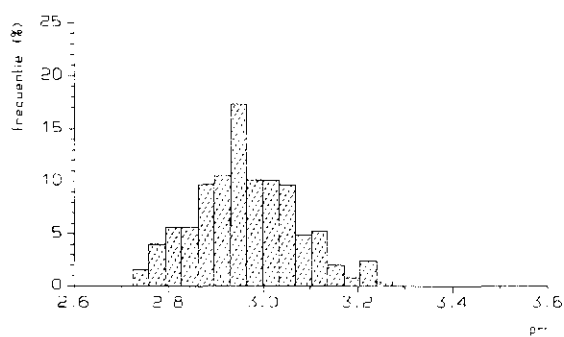
met de bijbehorende standaarddeviatie is gegeven voor de jaren 1987, 2000 en 2010. Uit de tabel blijkt dat de gemiddelde pH-stijging in laag 1 en laag 3 vrijwel gelijk is (resp. 0,26 en 0,23).

Tabel 15 Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de pH in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010.

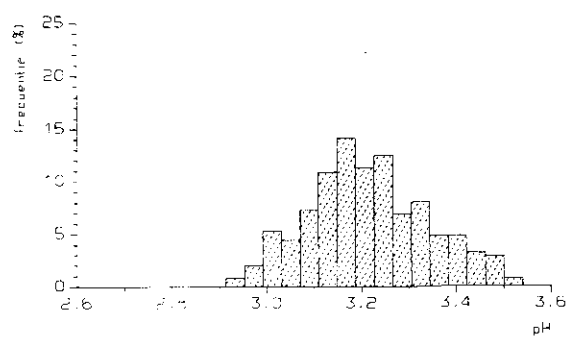
	Laag 1			Laag 3		
	1987	2000	2010	1987	2000	2010
gemiddelde	2,96	3,10	3,22	4,10	4,21	4,33
standaarddeviatie	0,106	0,111	0,126	0,131	0,123	0,138
variatie-coëfficiënt	0,036	0,036	0,039	0,032	0,031	0,032

Teneinde meer inzicht te krijgen in de kansverdeling van de pH-waarden gedurende de simulatie zijn in fig. 6 histogrammen gegeven van de pH in laag 1 en laag 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode. Uit de histogrammen blijkt dat de pH-waarden in laag 3 scheef verdeeld zijn. Dit komt overeen met de veldgegevens van Kleijn et al. (1989).

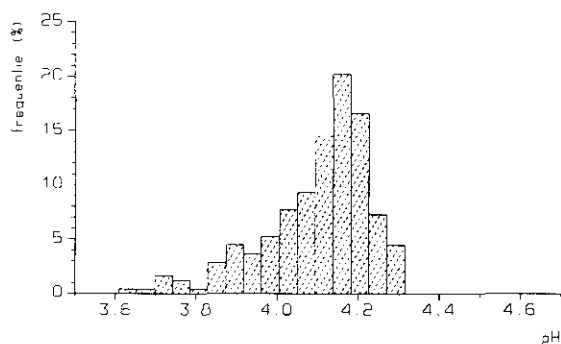
De pH-stijging gedurende de simulatie-periode is ook in de histogrammen waar te nemen, terwijl tevens op te maken valt dat de spreiding in de gesimuleerde pH in laag 1 in 2010 enigszins is toegenomen ten opzichte van 1987.



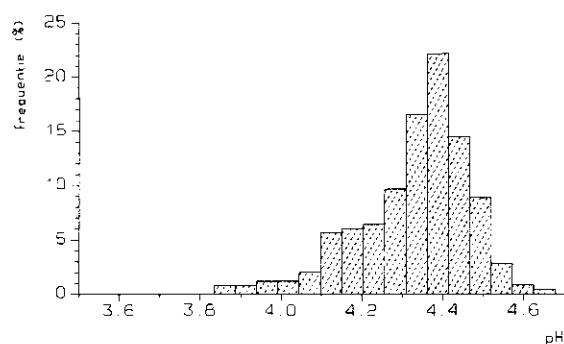
laag 1 1987



laag 1 2010



laag 3 1987



laag 3 2010

Fig. 6 Histogrammen van de pH in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode.

5.1.2 Nitraatconcentratie

In fig. 7 is het verloop van de NO_3 -concentratie in de tijd in laag 1 en laag 3 weergegeven.

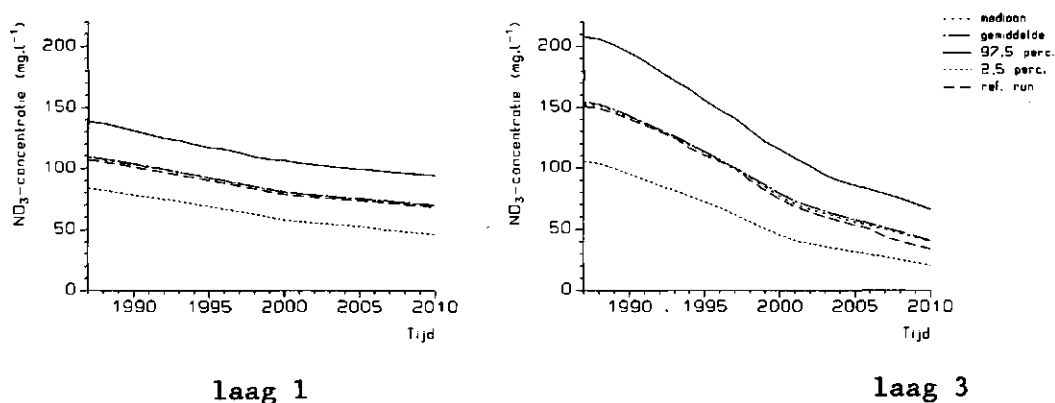


Fig. 7 Verloop van de NO₃-concentratie (mg.l⁻¹) in de tijd in laag 1 en laag 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run.

Uit fig. 7 blijkt dat de onzekerheid in de NO₃-concentratie in laag 1 absoluut gezien vrijwel gelijk blijft en in laag 3 sterk afneemt. De referentie-run in zowel laag 1 als in laag 3 komt nagenoeg overeen met het gemiddelde van alle Monte Carlo-simulaties.

Verder blijkt dat de NO₃-concentratie in laag 1 minder sterk afneemt dan in laag 3. De geringe afname in laag 1 is het gevolg van de constant veronderstelde nutriëntencyclus. Dit heeft tot gevolg dat het relatieve aandeel van de nutriëntencyclus in de N-belasting toeneemt in de tijd. De gemiddelde N-belasting ($k_{bv} \cdot H_{bl} \cdot gN_{bl}$) via de bladval bedraagt ca. 5,3 kmol_c.ha⁻¹.jr⁻¹ (zie tabel 8 en 11). De gemiddelde totale N-opname bedraagt 5,3 kmol_c.ha⁻¹.jr⁻¹ plus de netto N-opname. De netto stamgroei gedurende de simulaties is 7420 kg.ha⁻¹.jr⁻¹. Bij een gemiddeld N-gehalte in de stammen (gN_{st}) van 0,11%, bedraagt de netto N-opname 0,58 kmol_c ha⁻¹ jr⁻¹. De totale opname bedraagt dus 5,88 kmol_c.ha⁻¹.jr⁻¹. Aangezien in de eerste laag weer 2,3 kmol_c.ha⁻¹.jr⁻¹ aan N wordt opgenomen, komt dit neer op een

gemiddelde N-uitspoeling uit deze laag van ca. $3 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ als gevolg van de nutriëntenkringloop. De totale N-depositie loopt gemiddeld terug van ca. $5,2 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ tot $1,5 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ (zie tabel 4, 5 en 7). Dit betekent dat de gemiddelde N-belasting in laag 1 slechts met ca. 45% afneemt (van 8,2 naar $4,5 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$) terwijl de depositie met 71% afneemt. In de praktijk zal naar alle waarschijnlijkheid bij een afnemende N-depositie een daling van het N-gehalte in de naalden plaatsvinden (Van den Burg en Kiewit, 1989; par. 4.1). Dit zal in eerste instantie een grotere N-uitspoeling veroorzaken. Wanneer zich echter opnieuw een stationaire nutriëntencyclus heeft ingesteld bij een verlaagd depositieniveau, zal een verlaging van het N-gehalte uiteindelijk leiden tot lagere NO_3 -concentraties in de bovengrond.

Aan de onderkant van de wortelzone (laag 3) zorgt de constante netto N-opname voor een relatief iets grotere reductie in totaal N-concentratie dan in het depositie scenario. Ten gevolge van de netto N-opname daalt de gemiddelde N-uitspoeling uit laag 3 van 4,6 naar $0,9 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ (80%) terwijl de N-depositie van ca. 5,2 naar $1,5 \text{ kmol}_c \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{jr}^{-1}$ daalt (71%). Bij de referentie-run is de daling van de NO_3 -concentratie in 2010 juist lager (ca. 63%) dan de reductie in de depositie. Dit wordt deels veroorzaakt door NH_4 -desorptie, gevolgd door nitrificatie. Afhankelijk van de grootte van de CEC duurt het ca. 5 jaar, voordat de NO_3 -concentratie in laag 3 zich heeft aangepast aan het in 2010 opgelegde depositieniveau. De nitraatconcentratie bedraagt dan ca. $31 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$. Dan is de procentuele daling in NO_3 -concentratie (ca. 79%) vrijwel gelijk aan de daling in het depositieniveau. Een dergelijk vertragingsmechanisme op de NO_3 -concentratie bij een reductie van de N-depositie is ook aangetoond door modelberekeningen uitgevoerd door van Grinsven (1988). In realiteit zal de periode waarin de NO_3 -concentratie zich aanpast aan het depositieniveau, waarschijnlijk nog langer duren als gevolg van verminderde opname en daardoor dalende N-gehalten.

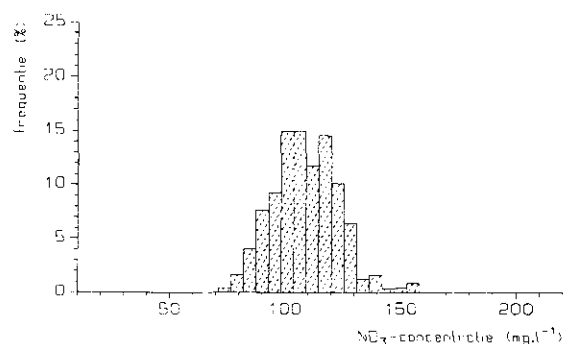
In 2010 ligt het 95% betrouwbaarheidsinterval in laag 3 tussen ca. 20 en 60 mg.l^{-1} . Laatstgenoemde waarde ligt overigens nog 10 mg.l^{-1} boven de norm voor NO_3 in drinkwater (50 mg.l^{-1}).

De daling in NO_3 -concentratie en de verandering in de onzekerheid met de tijd zijn nader geïllustreerd in tabel 16, waarin de gemiddelde NO_3 -concentratie in 1987, 2000 en 2010 is gegeven met de bijbehorende standaarddeviatie. Uit de tabel blijkt dat de onzekerheid absoluut gezien afneemt met de tijd (afnemende standaarddeviatie) maar relatief gezien toeneemt (toenemende variatie-coëfficiënt).

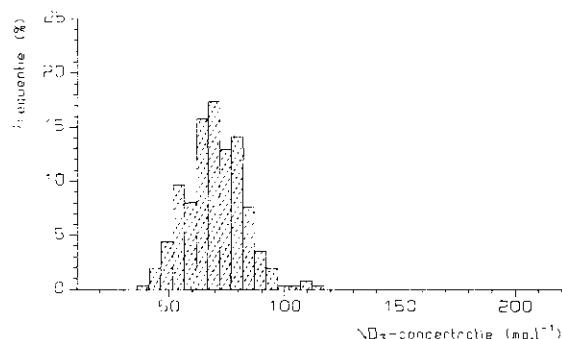
Tabel 16 Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de NO_3 -concentratie (mg.l^{-1}), in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010.

	Laag 1			Laag 3		
	1987	2000	2010	1987	2000	2010
gemiddelde	109,1	80,0	69,8	154,2	78,7	40,5
standaarddeviatie	14,2	12,6	12,7	27,1	18,0	12,1
variatie-coëfficiënt	0,13	0,16	0,18	0,18	0,23	0,30

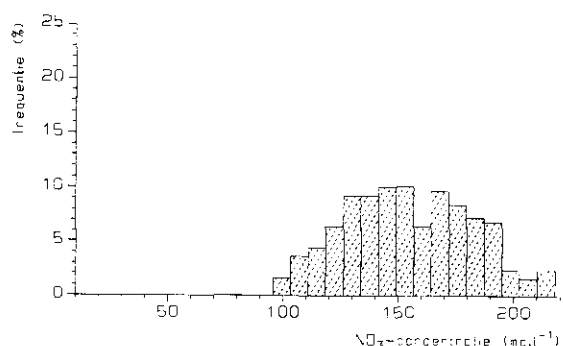
De verandering in de kansverdeling van de NO_3 -concentraties gedurende de simulatie-periode is geïllustreerd in fig. 8.



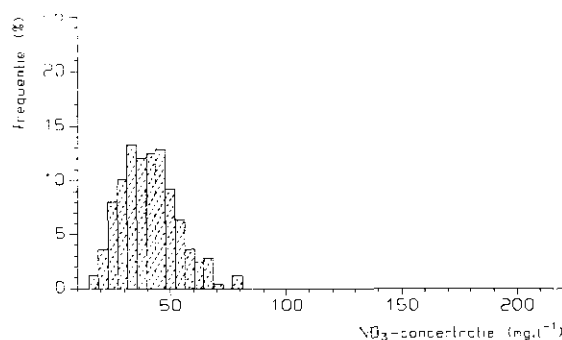
laag 1 1987



laag 1 2010



laag 3 1987



laag 3 2010

Fig. 8 Histogrammen van de NO_3 -concentratie (mg.l^{-1}) in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode.

Uit de histogrammen blijkt dat de NO_3 -concentraties redelijk normaal verdeeld zijn. De daling in NO_3 -concentratie gedurende de simulatie-periode komt ook in fig. 8 tot uiting. Opvallend is dat de NO_3 -concentratie in 1987 toeneemt met de diepte, terwijl deze in 2010 afneemt met de diepte, wat veroorzaakt wordt door de relatief grotere bijdrage van de stikstofcyclus bij een lagere depositie (zie hierboven).

5.1.3 Ammonium/kalium-molratio

In fig. 9 is het verloop van de NH_4/K -molratio in de tijd in laag 1 en laag 3 weergegeven.

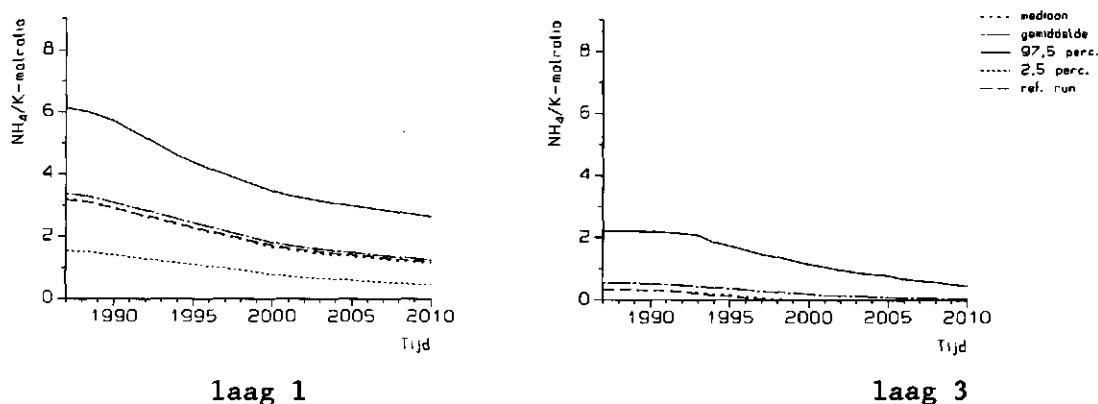


Fig. 9 Verloop van de NH_4/K -molratio in de tijd in laag 1 en laag 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run.

Uit fig. 9 blijkt dat de onzekerheid in de NH_4/K -molratio in laag 1, absoluut gezien, duidelijk groter is dan in laag 3. In beide lagen neemt de onzekerheid gedurende de simulatie-periode, absoluut gezien, sterk af. Dit komt door het afnemende (stikstof) depositiescenario (par. 5.2.2.3). De referentie-run ligt in beide lagen iets lager dan het gemiddelde van alle Monte Carlo-simulaties. De mediaan ligt eveneens in beide lagen onder het gemiddelde. Dit betekent dat er sprake is van een scheve verdeling (zie ook fig. 10).

Uit fig. 9 blijkt verder dat de gemiddelde NH_4/K -molratio in laag 1 in de tijd afloopt van ca. 3 tot ca. 2. In laag 3 is de gemiddelde NH_4/K -molratio gedurende de gehele simulatie-periode ca. 2 eenheden lager voornamelijk als gevolg van nitrificatie. In beide lagen blijft gedurende de gehele simulatieperiode de gemiddelde NH_4/K -molratio onder het kritische niveau van 5.

Evenals de NO_3 -concentratie zet de daling in de NH_4/K -molratio zich vanaf 2010 nog ca. 5 jaar door tengevolge van NH_4 -desorptie, terwijl het depositieniveau vanaf 2010 gehandhaafd blijft. Daarnaast dient ook hier opgemerkt te worden, dat ten gevolge van de niet meegenomen terugkoppeling tussen de afnemende N-depositie en afnemende N-gehalten in naalden (par. 4.2 en 5.1.2) de uiteindelijke NH_4/K -molratio's in de bovengrond door het model iets overschat zouden kunnen worden. Vergelijking met de veldwaarnemingen wijst hier overigens niet op, wat samenhangt met een duidelijke overschatting van de nitrificatie (zie hieronder).

De daling in de NH_4/K -molratio en de trend in de tijd zijn nader geïllustreerd in tabel 17.

Tabel 17 Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de NH_4/K -molratio in laag 1 en laag 3 in 1987, 2000 en 2010.

	Laag 1			Laag 3		
	1987	2000	2010	1987	2000	2010
gemiddelde	3,36	1,80	1,24	0,54	0,19	0,04
standaarddeviatie	1,17	0,71	0,56	0,62	0,32	0,11
variatie-coëfficiënt	0,35	0,40	0,45	1,14	1,64	3,16

Evenals bij de NO_3 -concentratie blijkt uit de tabel dat de onzekerheid absoluut gezien afneemt met de tijd, maar relatief gezien toeneemt.

De verandering in de kansverdeling van de NH_4/K -molratio gedurende de simulatie-periode is geïllustreerd in fig. 10.

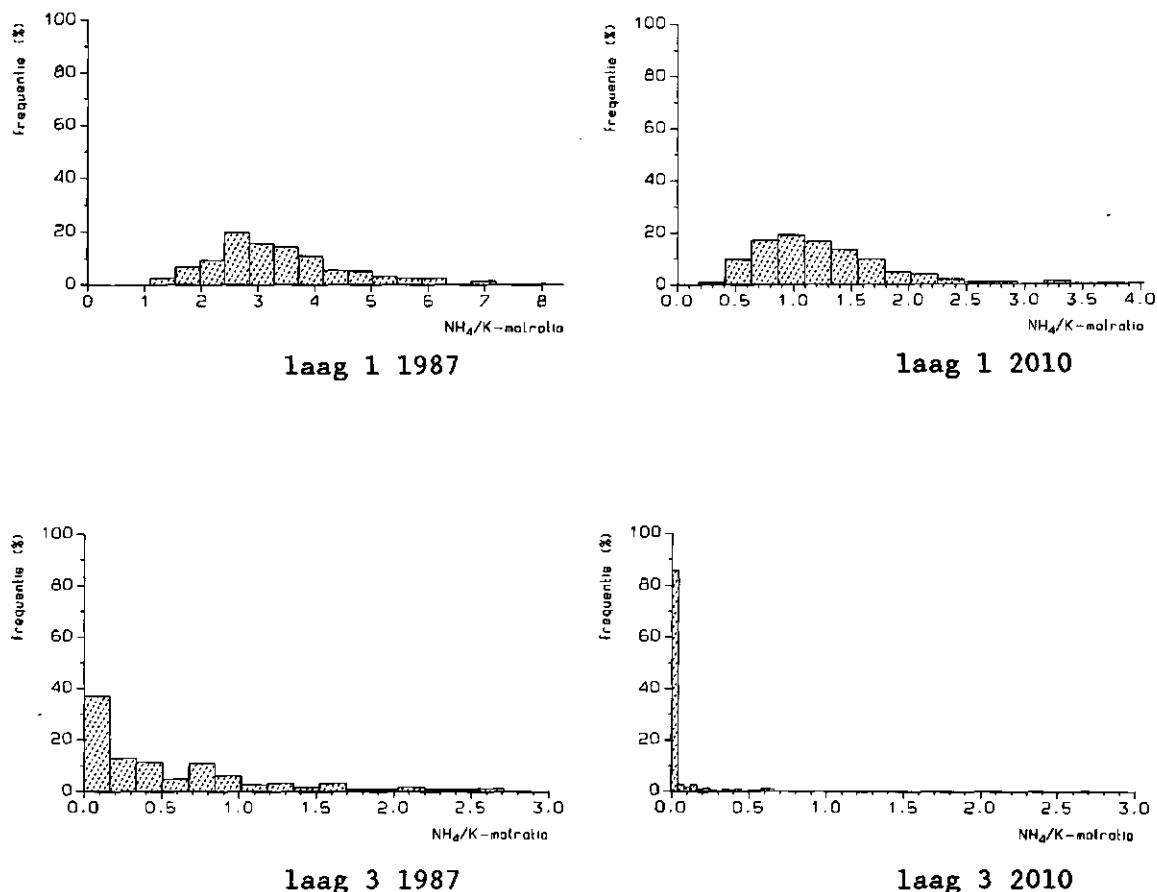


Fig. 10 Histogrammen van de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode.

Uit fig. 10 blijkt dat de NH_4/K -molratio in zowel laag 1 als in laag 3 vrij scheef verdeeld is (zie ook fig. 9). Dit komt overeen met gegevens gebaseerd op een veldonderzoek in Douglasopstanden (Kleijn et al., 1989) (zie hieronder). Verder valt op dat het model in laag 3 extreem lage NH_4/K -molratio's berekent, wat wijst op een overschatting van de nitrificatie. In fig. 11 zijn de modeluitkomsten in 1987 voor laag 1 en laag 3 vergeleken met veldwaarnemingen in deze periode voor lagen met een vergelijkbare diepte.

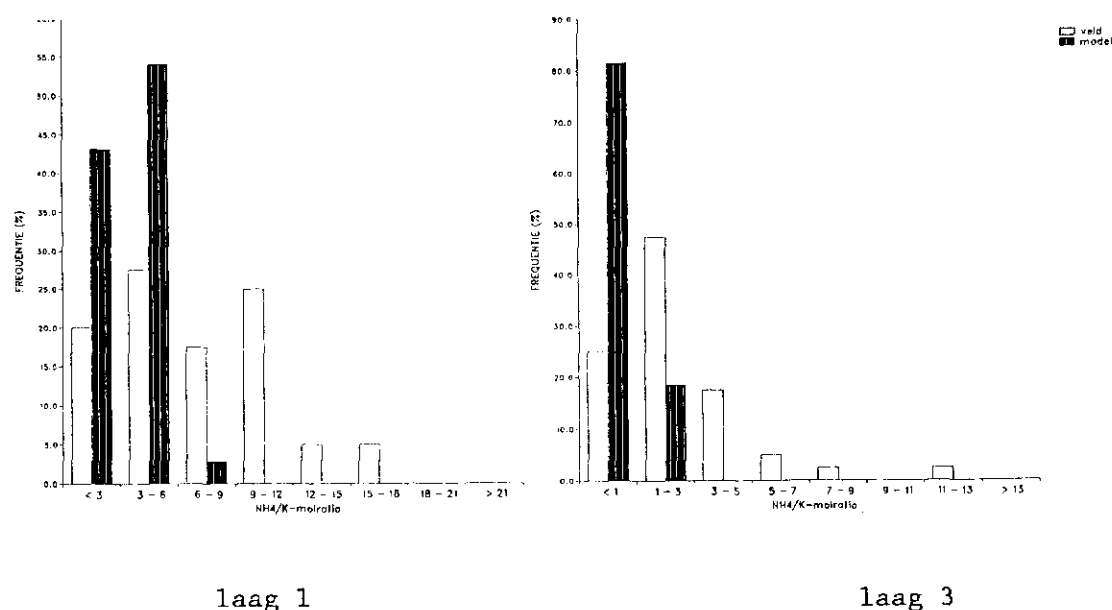


Fig. 11 Histogrammen van de gemiddelde NH_4/K -molratio's in laag 1 en 3 afkomstig uit veldonderzoek (Kleijn et al., 1989), tezamen met de modeluitkomsten voor 1987.

De veldgegevens zijn 40 jaargemiddelde concentraties in acht Douglasopstanden (5 monsterpunten per opstand, 4 metingen per jaar) in resp. een laag van 0-15 cm (vergelijkbaar met laag 1) en een laag van 45-60 cm (vergelijkbaar met laag 3).

Uit fig. 11 blijkt dat er duidelijk sprake is van een onderschatting van de NH_4/K -molratio. Verder blijken beide verdelingen scheef te zijn, zij het dat de modeluitkomsten schever verdeeld zijn, terwijl de mate van onzekerheid in de modeluitkomsten veel kleiner is dan de variatie in veldgegevens. Dit laatste hangt samen met een te klein gekozen onzekerheid van de gecalibreerde k_{nit} . Dit komt omdat alleen de gemiddelde waarde van k_{nit} gecalibreerd is op één dataset (zie par. 4.2.4.2) terwijl de minima en maxima volledig arbitrair gekozen zijn. Blijkbaar zijn met name de gekozen minima te hoog. Overigens is het wel zo dat de inputs (depositie) en bodemvariabelen behorende bij de huidige

veldgegevens niet helemaal te vergelijken zijn met de model-situatie (par. 5.1). In de toekomst zal derhalve onderzoek gedaan moeten worden naar een geschikte methode om de range in k_{nit} te calibreren op basis van veldgegevens.

5.1.4 Aluminium/calcium-molratio

In fig. 12 is het verloop van de Al/Ca-molratio in de tijd in laag 1 en laag 3 weergegeven.

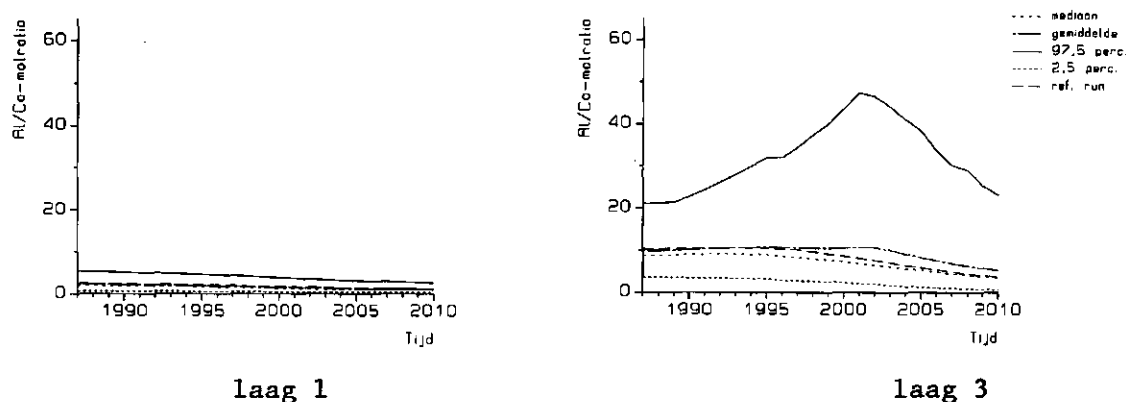


Fig. 12 Verloop van de Al/Ca-molratio in de tijd in laag 1 en 3 voor het gemiddelde, mediaan, 97,5 en 2,5 percentiel en de referentie-run.

Uit fig. 12 blijkt dat de onzekerheid in Al/Ca-molratio in laag 3 zeer veel groter is dan in laag 1. Verder is het opvallend dat de Al/Ca-molratio alsmede de onzekerheid daarin in laag 3 in eerste instantie een stijging vertoont en vervolgens pas gaat dalen. Dit wordt veroorzaakt door veranderingen aan het adsorptiecomplex. Door het dalende depositiescenario neemt zowel de H- als Al-concentratie af. Hierdoor vindt er relatief meer uitwisseling

van Ca tegen geadsorbeerd H plaats dan van Al tegen geadsorbeerd H, waardoor de Ca-concentratie (tijdelijk) relatief sterker afneemt dan de Al-concentratie. Dit laatste resulteert in een tijdelijke toename van de Al/Ca-molratio.

Zowel in laag 1 als in laag 3 komt de referentie-run redelijk overeen met het gemiddelde, zij het dat de referentie-run in laag 3 na 1995 duidelijk afwijkt.

Het feit dat de referentie-run afwijkt van het gemiddelde is ook af te leiden uit de slechte fit van het lineaire regressie-model op de Al/Ca-molratio in laag 3 (paragraaf 5.2.1). De COD van het regressie-model op de Al/Ca-molratio in laag 3 neemt na 1995 duidelijk af (fig. 15). Indien er sprake is van een COD in de buurt van 1, met andere woorden een sterk lineair gedrag, zal de referentie-run sterk op de gemiddelde run lijken. De afname van de COD van de Al/Ca-molratio in laag 3 duidt op een niet lineair gedrag, dat blijkbaar resulteert in een lagere referentie Al/Ca-molratio ten opzichte van het gemiddelde.

De daling in Al/Ca-molratio en de verandering in de onzekerheid daarvan in de tijd zijn nader geïllustreerd in tabel 18.

Tabel 18 Gemiddelde, standaarddeviatie en variatie-coëfficiënt van de Al/Ca-molratio in laag 1 en 3 in 1987, 2000 en 2010.

	Laag 1			Laag 3		
	1987	2000	2010	1987	2000	2010
gemiddelde	2,27	1,52	1,02	9,80	10,53	5,30
standaarddeviatie	1,20	0,89	0,60	4,96	11,62	6,52
variatie-coëfficiënt	0,53	0,59	0,59	0,51	1,10	1,23

Uit tabel 18 blijkt dat in het algemeen de absolute (standaard-deviatie) en relatieve onzekerheid (variatie-coëfficiënt) in de Al/Ca-molratio in laag 3 groter is dan in laag 1.

Het dalende depositieniveau heeft een duidelijk positief effect op de Al/Ca-molratio. In zowel laag 1 als in laag 3 neemt de gemiddelde Al/Ca-molratio af met ca. 50%.

Wanneer in het model geen constante nutriëntencyclus verondersteld was zou op de lange termijn de daling van de Al/Ca-molratio in laag 1 nog groter zijn geweest als gevolg van dalende N-gehalten in de naalden, waardoor de zuurproduktie via N-mineralisatie gevolgd door nitrificatie lager zou zijn geweest.

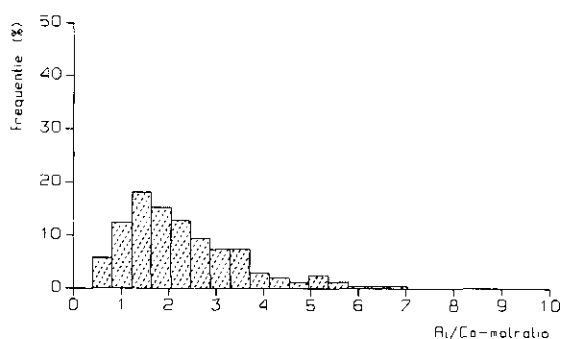
Samenvattend kan worden geconcludeerd dat de aanname van een stationaire nutriëntencyclus, in het geval van een dalend depositiescenario, waarschijnlijk tot een overschatting van de NO_3 -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca-molratio leidt, en tot een onderschatting van de pH.

Opvallend is dat ondanks de forse depositiereductie de gemiddelde Al/Ca-molratio in laag 3 ruim boven de kritische waarde van 1 blijft. Modelberekeningen over een langere periode hebben echter aangetoond dat de Al/Ca-molratio in laag 3 in de periode 2010-2030 met nog ca. 3 eenheden zal dalen als gevolg van de afname in Ca-adsorptie.

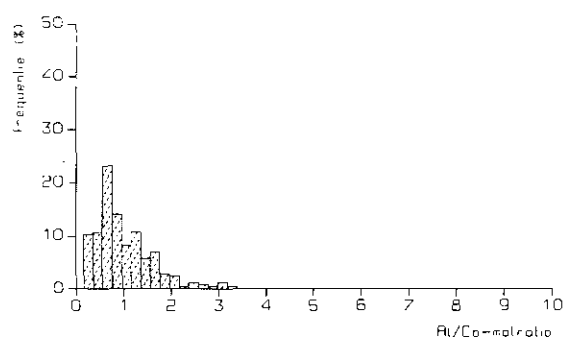
In fig. 13 is de verandering in de kansverdeling van de Al/Ca-molratio in de tijd geïllustreerd. Uit de figuur blijkt dat de Al/Ca-molratio's, evenals de NH_4/K -molratio's, scheef verdeeld zijn. Dit komt opnieuw overeen met veldgegevens hierover (Kleijn et al., 1989; zie hieronder).

Evenals bij de NH_4/K -molratio's kunnen we een vergelijking maken tussen verdelingen van de gesimuleerde Al/Ca-molratio's aan het begin van de simulatie-periode en de Al/Ca-molratio's afkomstig

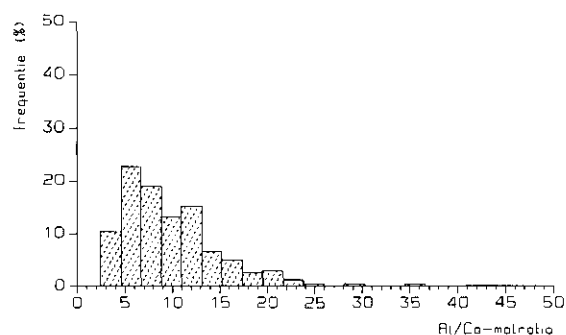
uit het veldonderzoek. Hierbij moet net als bij de NH_4/K -molratio's bedacht worden dat het hier geen flux gemiddelde jaarlijkse concentraties betreft, maar een benadering hiervoor en dat de flux gemiddelde jaarlijkse Al/Ca-molratio's naar alle waarschijnlijkheid een kleinere spreiding vertonen.



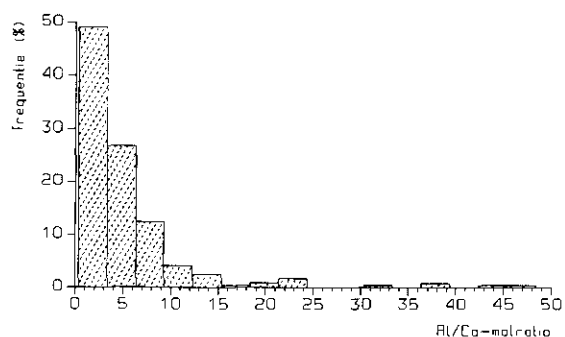
laag 1 1987



laag 1 2010



laag 3 1987



laag 3 2010

Fig. 13 Histogrammen van de Al/Ca-molratio in laag 1 en 3 aan het begin en eind van de simulatie-periode.

Vergelijking tussen de veldgegevens en de gesimuleerde Al/Ca-molratio's (fig. 14) laat zien dat in zowel laag 1 als in laag 3

duidelijk sprake is van een overschatting van de gesimuleerde Al/Ca-molratio's.

De overschatting van de Al/Ca-molratio's hangt nauw samen met de onderschatting van de NH_4/K -molratio's. Door een te hoog ingestelde k_{nit} wordt er te veel NH_4 genitrificeerd wat resulteert in te lage NH_4/K -molratio's. De te hoge nitrificatie resulteert in een overschatting van de zuurbelasting met als gevolg een te hoge Al-hydroxide verwerking en daarmee een overschatting van de Al/Ca-molratio.

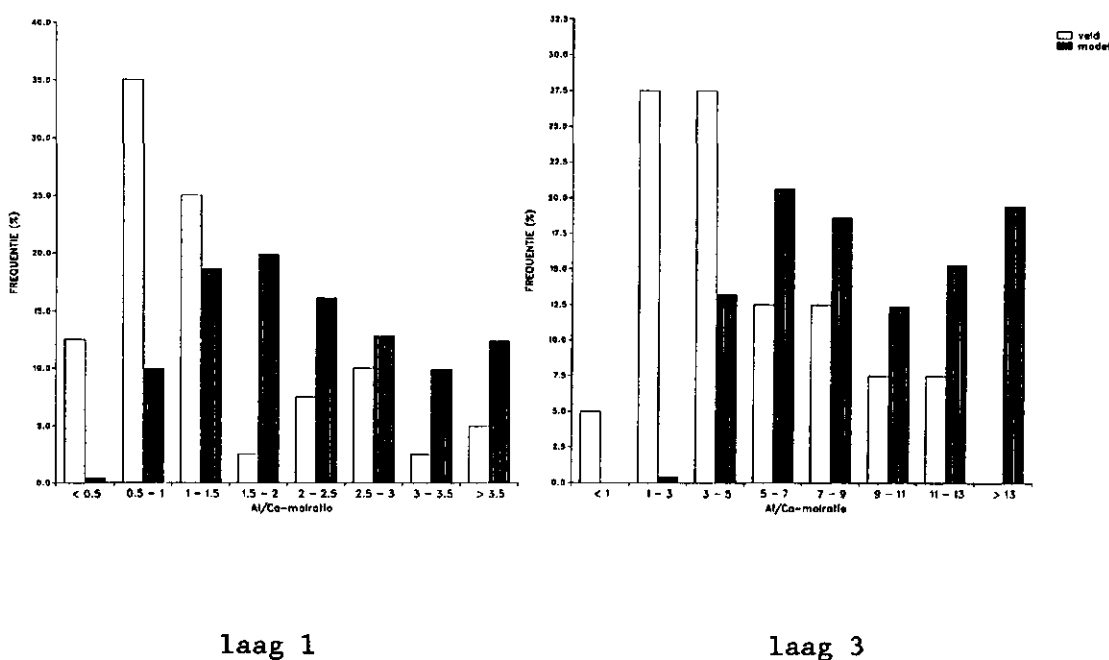


Fig. 14 Histogrammen van de gemiddelde Al/Ca-molratio's in laag 1 en 3, afkomstig uit veldonderzoek (Kleijn et al. 1989), tezamen met de modeluitkomsten voor 1987.

5.2 Bijdrage van de onzekerheidsbronnen

In paragraaf 2.3 zijn verschillende correlatie- en regressiematen (tabel 1) besproken die gebruikt kunnen worden om de bijdrage van de parameters en de variabelen aan de onzekerheid in de modeluitkomsten vast te stellen. Enerzijds dienen deze maten om de bijdrage van de onzekerheden te rangschikken op grootte orde. Anderzijds maken zij duidelijk hoe de bijdrage tot de onzekerheid in de tijd verandert. Deze aspecten komen in de volgende subparagrafen successievelijk aan de orde.

5.2.1 Gebruikte onzekerheidsmaat

In paragraaf 2.3.3 is weergegeven hoe men uit de veelheid van maten in tabel 1 een geschikte keuze gemaakt kan worden. Voorgesteld werd om allereerst aan de hand van de waarde van de COD (R^2) na te gaan in hoeverre de toepassing van een lineair regressie-model gerechtvaardigd is. In fig. 15 is het COD-verloop in de tijd voor de bestudeerde modeluitgangen weergegeven. Deze figuur laat zien dat de COD met uitzondering voor de NH_4/K - en de Al/Ca -molratio in laag 3, in de buurt van 1 ligt.

Voor de NH_4/K - en de Al/Ca -molratio in laag 3 zijn vervolgens de rang-getransformeerde data geanalyseerd.

De waarde van RCOD (R^2 voor ranggetransformeerde data) van deze regressie is weergegeven in fig. 16. De RCOD voor de Al/Ca -molratio in laag 3 blijkt in de buurt van 1 te liggen. Dit duidt erop dat de relatie tussen de onzekerheidsbronnen en de modeluitgang een monotoon karakter heeft. De analyse van de ranggetransformeerde data van de NH_4/K -molratio in laag 3 levert echter geen noemenswaardige verhoging van de R^2 op.

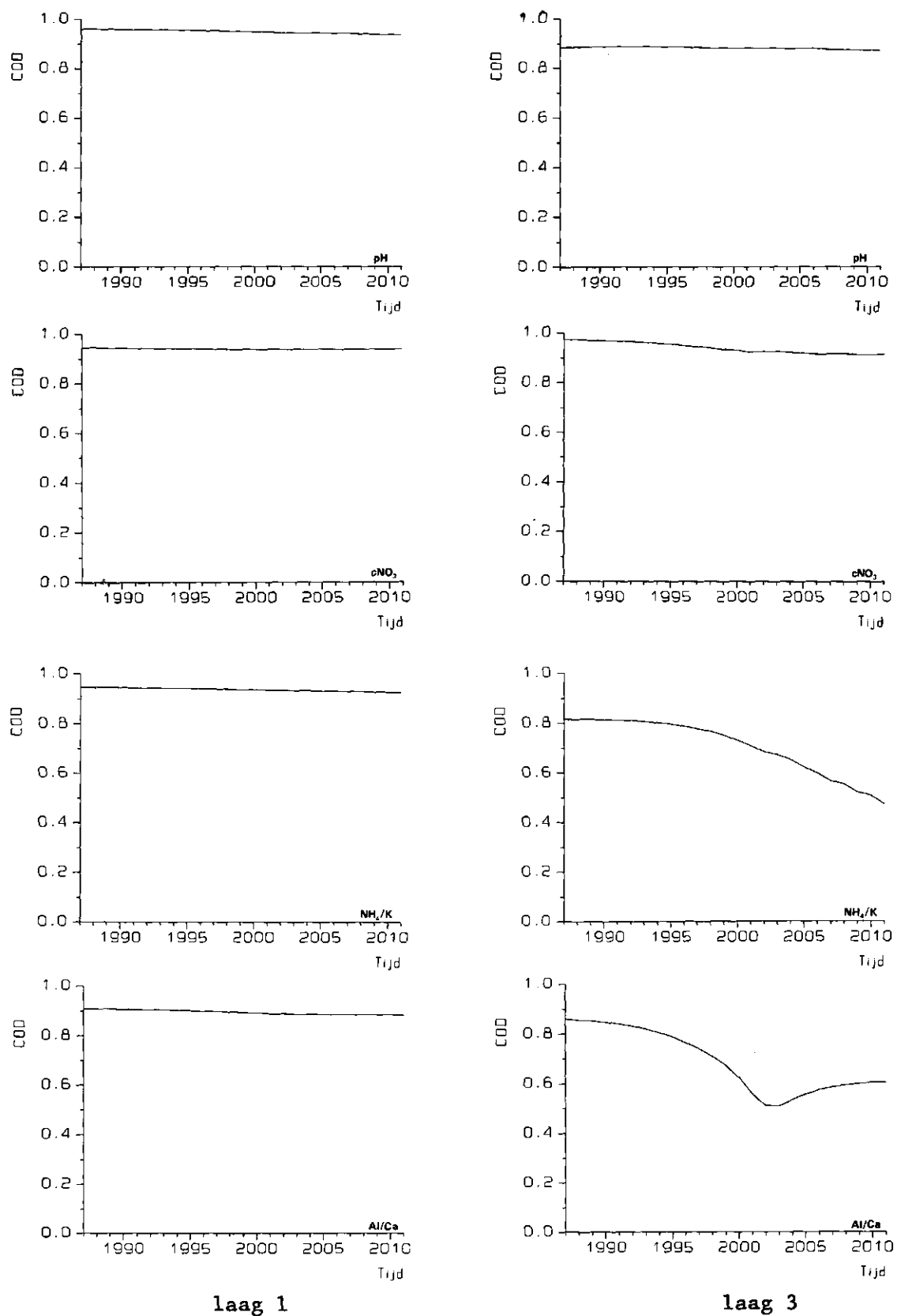


Fig. 15 Verloop van de COD voor de pH, de NO_3^- -concentratie, en de Al/Ca - en NH_4^+/K -molratio in laag 1 en 3.

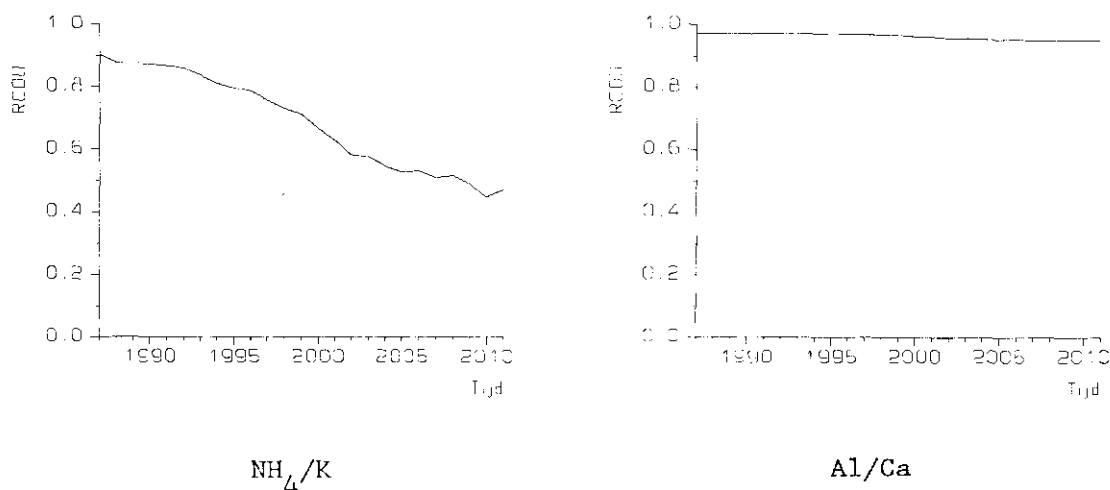


Fig. 16 Verloop van de RCOD voor de ranggetransformeerde
 NH_4/K -molratio en Al/Ca -molratio in laag 3.

Nadere bestudering van de scatterplots voor de NH_4/K -molratio wijst erop dat de slechte fit van het regressie-model op de oorspronkelijke en de ranggetransformeerde data waarschijnlijk te wijten is aan enkele "uitschieters" in de gesimuleerde data (fig. 17b). In 2010 is voor de meeste modelruns de NH_4/K -molratio 0 en voor enkele "uitschieters" groter dan 0. Op de oorzaak van deze uitschieters zal in paragraaf 5.2.2 nader worden ingegaan. Pogingen om via een logaritmische en een reciproke transformatie tot een beter resultaat te komen, leverden eveneens onbevredigende resultaten op. Om een beter regressie-model te krijgen is nader onderzoek nodig naar enerzijds niet lineaire regressie-modellen en anderzijds naar een geschikte data transformatie.

Het feit dat de COD voor het merendeel der gevallen in de buurt van 1 ligt (fig. 15) wijst erop dat de relatie tussen de parameters/variabelen en de modeluitkomsten in het algemeen goed te benaderen is door middel van een lineair model. Volgens par. 2.3.4 is in dit geval de RTU in het algemeen een geschikte maat voor de bijdrage van de individuele onzekerheidsbronnen.

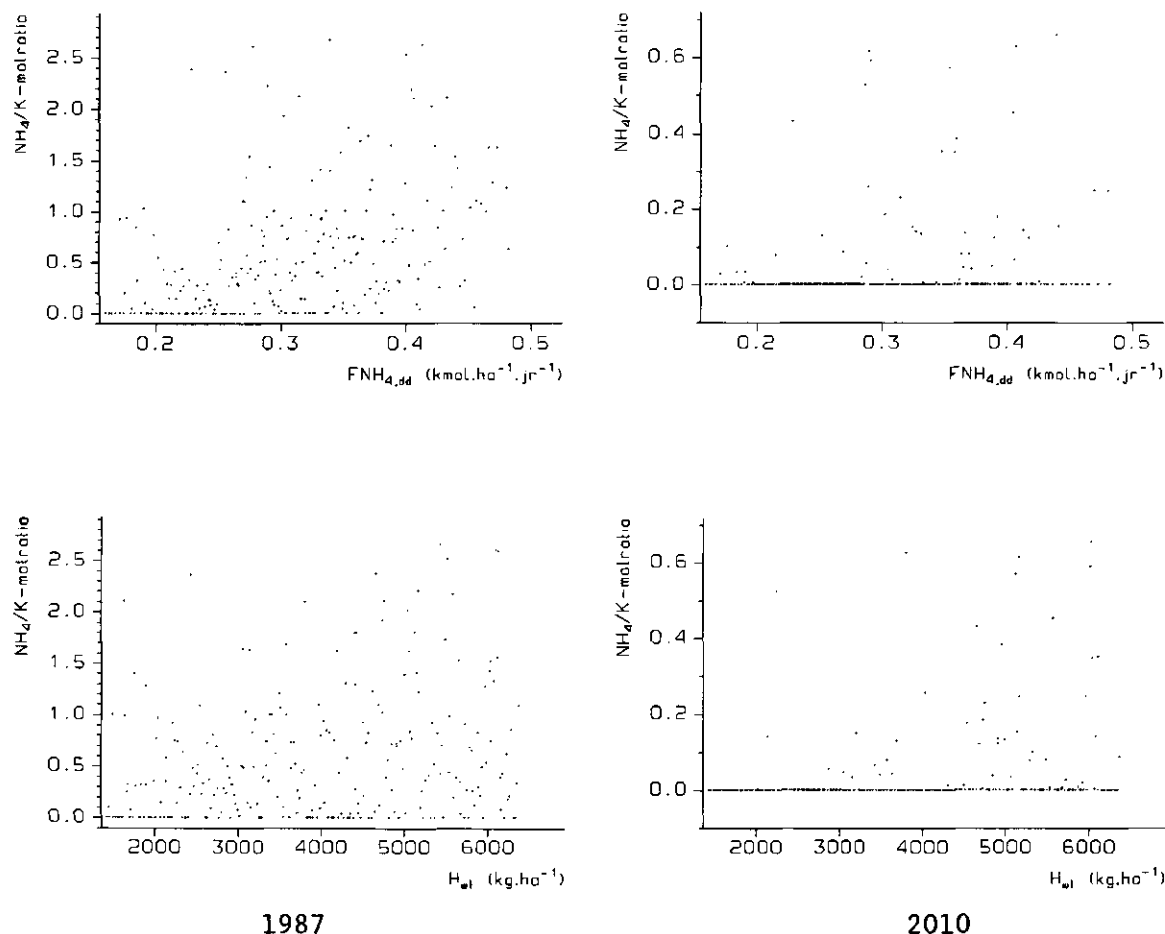


Fig. 17 Scatterplots voor de NH_4/K -molratio in 1987 en 2010.

In twijfelgevallen (o.a. bij sterke correlaties) verdient het aanbeveling om ook de SRC in de beschouwing te betrekken. Voor de analyse van de Al/Ca -molratio in laag 3 zal gebruik worden gemaakt van de SRRRC omdat alleen de ranggetransformeerde data hier goed met een lineair model te beschrijven zijn. Voor de NH_4/K -molratio in laag 3 zal ondanks de matige fit toch gebruik worden gemaakt van lineaire regressie op de oorspronkelijke data. Hierbij moet worden bedacht dat de gebruikte analyse-methode voor de NH_4/K -molratio in laag 3 niet optimaal is. Dit geldt echter ook voor de ranggetransformeerde data, zodat gebruik van SRRRC hier geen verbetering is.

5.2.2 Analyse van de onzekerheidsbronnen

De bijdragen van modelparameters en variabelen aan de onzekerheid van resp. pH, NO_3 -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca -molratio, worden in de volgende subparagrafen geïdentificeerd aan de hand van een tabel, waarin de 10 belangrijkste onzekerheidsbronnen (inputs, parameters en variabelen) zijn gerangschikt op basis van de RTU in 1987 (par. 2.3.2). Mocht een onzekerheidsbron in de periode 1987-2010 een RTU-rangnummer krijgen dat 3 of kleiner is, dan is deze onzekerheidsbron aan de tabel toegevoegd. Tevens is de SRC aan de tabellen toegevoegd, omdat deze maat, in tegenstelling tot de RTU (die altijd positief is), een relevant teken bevat, mits de absolute waarde van de SRC relatief groot is en de onderlinge correlaties gering zijn. Bij een positieve SRC is sprake van een positief verband tussen de bestudeerde model in- en uitgang, bij een negatieve SRC is er sprake van een negatief verband. Wanneer er geen onderlinge correlaties zijn is de absolute waarde van de SRC gelijk aan de RTU (par. 2.3.2). Bovendien maakt een vergelijking van de RTU en de SRC in "twijfelgevallen" (o.a. bij grote correlaties) een weloverwogen analyse mogelijk van de onzekerheidsbijdrage van de bronnen.

Daarnaast wordt telkens van modelinputs en/of -parameters en/of -variabelen, waarvan in de periode 1987-2010 het RTU rangnummer 3 of kleiner is, het verloop van de RTU in de tijd weergegeven.

5.2.2.1 pH

In tabel 19 zijn de bijdragen van de belangrijkste onzekerheidsbronnen (inputs, parameters en variabelen) aan de onzekerheid van de pH-voorspelling in laag 1 en 3 weergegeven voor de jaren 1987, 2000 en 2010. In tabel 19 zijn per tijdstip de 3 belangrijkste onzekerheidsbronnen vet gedrukt.

Tabel 19 Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de pH in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010.

Onzekerheids- bron	1987		2000		2010	
	RTU	SRC	RTU	SRC	RTU	SRC
laag 1:						
$gAl_{ox,1}$	0,68 (1)	0,67 (1)	0,63 (1)	0,62 (1)	0,57 (1)	0,55 (1)
$FSO_{2,dd}$	0,39 (2)	-0,21 (4)	0,32 (3)	-0,11 (14)	0,24 (8)	-0,01 (56)
$FNH_{3,dd}$	0,37 (3)	-0,18 (6)	0,32 (2)	-0,21 (5)	0,25 (6)	-0,22 (9)
$kAl_{v,ox,1}$	0,36 (4)	0,34 (2)	0,30 (4)	0,28 (3)	0,25 (5)	0,22 (8)
$k_{nit,1}$	0,29 (5)	-0,28 (3)	0,29 (5)	-0,29 (2)	0,28 (4)	-0,28 (5)
$FNO_{x,dd}$	0,28 (6)	-0,04 (23)	0,24 (6)	-0,06 (21)	0,18 (10)	-0,07 (18)
$f_{wt,1}$	0,16 (7)	-0,18 (5)	0,12 (12)	-0,15 (11)	0,05 (26)	-0,07 (19)
$k_{nit,0}$	0,14 (8)	-0,15 (8)	0,16 (10)	-0,17 (9)	0,17 (12)	-0,17 (10)
EN_{bl}	0,13 (9)	-0,11 (9)	0,22 (8)	-0,20 (7)	0,31 (2)	-0,30 (4)
FCI_{dn}	0,12 (10)	-0,17 (7)	0,18 (9)	-0,26 (4)	0,24 (7)	-0,34 (2)
CEC_1	0,10 (11)	-0,07 (13)	0,23 (7)	-0,20 (6)	0,28 (3)	-0,26 (6)
laag 3:						
k_{gibb}	0,90 (1)	0,91 (1)	0,89 (1)	0,89 (1)	0,80 (1)	0,81 (1)
$FNH_{3,dd}$	0,16 (2)	-0,17 (2)	0,16 (2)	-0,19 (3)	0,21 (3)	-0,18 (4)
$FSO_{2,dd}$	0,15 (3)	0,05 (17)	0,15 (3)	0,08 (8)	0,21 (4)	0,01 (67)
$FNO_{x,dd}$	0,12 (4)	-0,09 (5)	0,12 (4)	-0,10 (6)	0,18 (5)	-0,12 (8)
$KK_{omw,1}$	0,10 (5)	-0,14 (3)	0,10 (6)	-0,14 (4)	0,09 (10)	-0,12 (7)
kNa_v	0,09 (6)	0,09 (6)	0,10 (7)	0,10 (7)	0,15 (7)	0,15 (5)
$KNH_{4,omw,3}$	0,07 (7)	-0,05 (14)	0,08 (9)	-0,02 (36)	0,08 (11)	-0,01 (66)
$k_{nit,3}$	0,07 (8)	-0,06 (12)	0,04 (22)	-0,03 (22)	0,05 (30)	-0,04 (31)
$KNH_{4,omw,1}$	0,06 (9)	0,05 (18)	0,06 (12)	0,05 (15)	0,06 (19)	0,06 (12)
FCI_{dn}	0,06 (10)	-0,11 (4)	0,11 (5)	-0,20 (2)	0,23 (2)	-0,36 (2)

De onzekerheid in de pH in laag 1 en 3 wordt voornamelijk bepaald door de parameters en variabelen die de H-buffering door Al-hydroxide bepalen (gAl_{ox} , K_{gibb} en in mindere mate $kAl_{v,ox}$). Opvallend is dat in laag 1 gAl_{ox} en in laag 3 K_{gibb} de belangrijkste bijdrage aan de onzekerheid in de pH levert. Dit laatste hangt nauw samen met het feit dat er in laag 1 sprake is van onderverzadiging ten opzichte van Al-hydroxide terwijl er in laag 3 sprake is van evenwicht ten opzichte van Al-hydroxide (zie par. 5.1.1).

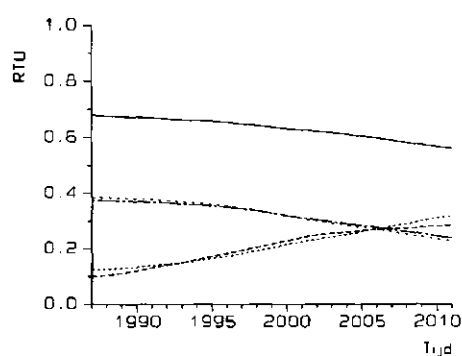
Naast de Al-verweringsparameters (K_{gibb} , $kAl_{v,ox}$, gAl_{ox}) leveren de droge-deposities van NH_3 , SO_2 en NO_x ($FNH_{3,dd}$, $FSO_{2,dd}$, $FNO_{x,dd}$), die in hoge mate de H-belasting bepalen, volgens de RTU een belangrijke bijdrage aan de onzekerheid in de pH in laag 1 en in laag 3. Bekijken we daarentegen de SRC's dan blijken $FSO_{2,dd}$ en $FNO_{x,dd}$ veel lager te zijn dan $FNH_{3,dd}$. Ze scoren zo hoog op de RTU-schaal omdat ze sterk gecorreleerd zijn met de "sterke" onzekerheidsbron $FNH_{3,dd}$. Op dit soort "artefacten" dienen we bedacht te zijn bij het gebruik van de RTU (zie ook par. 2.3.4). In het algemeen kan gesteld worden dat verschillen tussen de RTU en de absolute waarde van de SRC het gevolg zijn van de opgelegde correlaties (par. 2.3.2; par. 4.2.5).

Aan het eind van de simulatie-periode blijkt ook de natte Cl-depositie een behoorlijke bijdrage aan de onzekerheid te leveren, met name in laag 3. Deze opmerkelijke uitkomst wordt veroorzaakt doordat tussen de deposities van Cl en Na geen functioneel verband is gehanteerd (op basis van de zeezoutconcentraties) maar een correlatie (par. 4.2.5). Dit heeft tot gevolg dat de Cl-depositie niet volledig gecompenseerd hoeft te worden door Na en de overige basische kationen. In dit geval zal het niet gecompenseerde deel (via de ionenbalans) door H worden gecompenseerd. In de praktijk is de Cl-depositie echter voor het overgrote deel afkomstig uit zeezout en dit wordt dan ook volledig gecompenseerd door Na en de overige basische kationen. De onzekerheidsbijdrage van FCl_{dn} moet dan ook gezien worden als een artefact van de

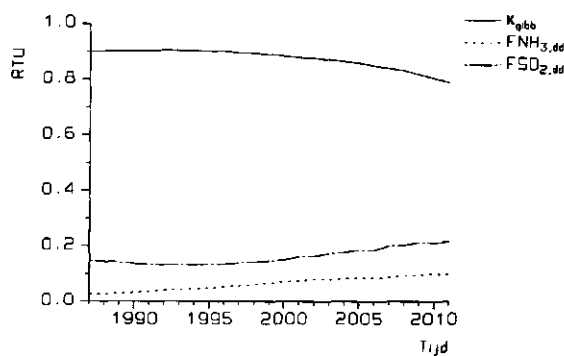
gebruikte verdiscontering. Het zou in dit geval beter zijn geweest wanneer in plaats van een correlatie tussen FCI_{dn} en FNa_{dn} er een functioneel verband tussen deze twee modelinputs zou zijn gebruikt.

In laag 1 spelen ook de parameters die de N-cyclus beïnvloeden ($k_{nit,0}$, $k_{nit,1}$ en gN_{b1}), een belangrijke rol. Tevens draagt op het eind van de simulatie-periode de CEC in belangrijke mate bij aan de onzekerheid. Deze bijdrage is echter van tijdelijke aard. Ten gevolge van de depositiereductie zal de samenstelling van het adsortiecomplex veranderen. Wanneer vervolgens de depositie constant wordt gehouden, stelt zich een nieuwe evenwichtssituatie in en neemt de onzekerheidsbijdrage van de CEC af.

In fig. 18 is het verloop van de RTU in de tijd tussen de belangrijkste modelparameters en de pH in laag 1 en 3 weergegeven te weten $gAl_{ox,1}$, $FNH_{3,dd}$, gN_{b1} , CEC_1 en $FSO_{2,dd}$ (alleen volgens de RTU).



laag 1



laag 3

Fig. 18 Verloop van de RTU in de tijd tussen modelparameters en de pH in laag 1 en 3.

De beïnvloeding van $gAl_{ox,1}$ op de pH in laag 1 en de K_{gibb} op de pH in laag 3 neemt in de tijd duidelijk af. Dit hangt samen met het afnemend depositiescenario. De bijdrage van de droge depositie van SO_2 ($FSO_{2,dd}$) aan de onzekerheid in de pH in laag 1 blijkt eveneens af te nemen in de tijd, terwijl de onzekerheidsbijdragen van $FSO_{2,dd}$ en $FNH_{3,dd}$ aan de pH in laag 3 toenemen in de tijd. Verder valt op dat naarmate de simulatie-periode vordert, de onzekerheidsbijdrage van het N-gehalte in de naalden (gN_{bl}) aan de pH in laag 1 toeneemt. Dit is het gevolg van de toename van het relatieve aandeel van de nutriëntencyclus aan de N-belasting (par. 5.1.2). Hierbij dient wel te worden bedacht dat er in de praktijk bij een afnemende N-depositie een daling van het N-gehalte in de naalden zal plaatsvinden (par. 5.1.2), waardoor de onzekerheidsbijdrage van gN_{bl} hier mogelijk iets wordt overschat.

Samenvattend kan gezegd worden dat de onzekerheid in de pH met name wordt bepaald door de onzekerheid in de parameters die de zuurproductie bepalen (met name k_{nit} , $FNH_{3,dd}$ (en de hiermee gecorreleerde $FSO_{2,dd}$), $FNO_{x,dd}$); de parameters die de zuurconsumptie bepalen (met name K_{gibb} en gAl_{ox}) en, bij een reductie van de depositie, in toenemende mate door parameters die de N-nutriëntencyclus beïnvloeden (o.a. gN_{bl}).

5.2.2.2 Nitraatconcentratie

In tabel 20 zijn de bijdragen van de belangrijkste onzekerheidsbronnen aan de onzekerheid in de NO_3 -concentratie-voorspelling in laag 1 en 3 weergegeven voor de jaren 1987, 2000 en 2010.

De onzekerheid in de NO_3 -concentratie in laag 1 wordt in 1987 voornamelijk bepaald door de droge NH_3 -depositie ($FNH_{3,dd}$) en vanaf 2000 in hoge mate door de naaldmassa (H_{bl}), de bladvalconstante (k_{bv}) en het stikstofgehalte in de naalden (gN_{bl}).

Tabel 20 Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010.

Onzekerheids- bron	1987		2000		2010	
	RTU	SRC	RTU	SRC	RTU	SRC
laag 1:						
FNH_3, dd	0,52 (1)	0,73 (1)	0,32 (4)	0,46 (4)	0,21 (5)	0,33 (4)
H_{bl}	0,48 (2)	0,72 (2)	0,61 (1)	0,93 (1)	0,64 (1)	0,97 (1)
FSO_2, dd	0,44 (3)	-0,35 (5)	0,27 (5)	-0,25 (5)	0,18 (7)	-0,21 (6)
gN_{bl}	0,41 (4)	0,43 (4)	0,55 (2)	0,56 (3)	0,58 (2)	0,59 (2)
k_{bv}	0,31 (5)	0,43 (3)	0,41 (3)	0,57 (2)	0,43 (3)	0,59 (3)
FNO_x, dd	0,31 (6)	0,28 (7)	0,22 (6)	0,23 (6)	0,16 (8)	0,20 (7)
$k_{\text{nit},1}$	0,29 (7)	0,31 (6)	0,20 (7)	0,22 (7)	0,15 (9)	0,16 (8)
$\text{HAL}_{\text{ox},1}$	0,22 (8)	0,23 (8)	0,11 (12)	0,12 (12)	0,07 (14)	0,08 (13)
k_{prot}	0,15 (9)	0,15 (10)	0,14 (10)	0,14 (11)	0,13 (11)	0,13 (10)
FCl_{dn}	0,14 (10)	-0,18 (9)	0,11 (13)	-0,15 (10)	0,09 (12)	-0,12 (11)
laag 3:						
FNH_3, dd	0,88 (1)	0,90 (1)	0,84 (1)	0,76 (1)	0,76 (1)	0,61 (1)
FSO_2, dd	0,79 (2)	-0,10 (8)	0,79 (2)	0,02 (49)	0,73 (2)	0,10 (9)
FNO_x, dd	0,53 (3)	0,21 (2)	0,56 (3)	0,21 (2)	0,55 (3)	0,21 (4)
FNH_3, dn	0,18 (4)	0,20 (3)	0,16 (4)	0,19 (3)	0,22 (4)	0,24 (2)
$k_{\text{nit},2}$	0,18 (5)	0,18 (4)	0,05 (23)	-0,05 (13)	0,09 (12)	-0,10 (8)
$\text{vFNH}_4, \text{opn}$	0,13 (6)	0,13 (5)	0,02 (54)	0,02 (36)	0,05 (22)	-0,05 (18)
H_{wt}	0,09 (7)	-0,12 (6)	0,03 (43)	-0,05 (12)	0,06 (17)	0,03 (35)
$k_{\text{nit},1}$	0,09 (8)	0,11 (7)	0,04 (25)	-0,02 (47)	0,11 (11)	-0,09 (10)
$k_{\text{nit},3}$	0,08 (9)	0,08 (9)	0,02 (49)	0,03 (26)	0,01 (72)	0,01 (56)
IL_{bl}	0,06 (10)	0,08 (10)	0,03 (47)	0,05 (15)	0,05 (23)	-0,06 (15)
CEC_2	0,04 (25)	-0,02 (31)	0,12 (6)	0,14 (5)	0,19 (5)	0,22 (3)
$\text{KNH}_4, \text{omw}, 2$	0,03 (32)	0,00 (75)	0,14 (5)	0,14 (4)	0,16 (6)	0,14 (5)

Deze vier modelparameters beïnvloeden direct de stikstofcyclus. Een verhoging van H_{b1} , k_{bv} en gN_{b1} resulteert in een grotere hoeveelheid N die via de vegetatie wordt "rondgepompt", terwijl $FNH_{3,dd}$ tot een grotere N-input leidt, wat direct of indirect (via nitrificatie) tot hogere NO_3 -concentraties leidt (positieve SRC).

De onzekerheid in de NO_3 -concentratie in laag 3 en daarmee ook in de NO_3 -uitspoeling (uit de wortelzone) wordt voor het overgrote deel bepaald door de N-depositie ($FNH_{3,dd}$, $FNO_{x,dd}$, $FNH_{3,dn}$).

Opvallend is dat ook de droge SO_2 -depositie volgens de RTU een belangrijke bijdrage levert aan de onzekerheid van de NO_3 -concentratie in zowel laag 1 als laag 3. Dit is een (kunstmatig) gevolg van de (opgelegde) correlatie tussen $FSO_{2,dd}$ enerzijds en $FNH_{3,dd}$ en $FNO_{x,dd}$ anderzijds (par. 4.2.5; 5.2.2.1).

Het effect van de opgelegde correlaties komt ook duidelijk tot uiting in het verschil tussen de RTU en de SRC van $FSO_{4,dd}$. De RTU is immers een maat die expliciet rekening houdt met correlaties, terwijl de SRC dit niet doet (par. 2.3.2). Met name in laag 3 wordt zichtbaar dat deze correlaties de invloed van de $FSO_{2,dd}$ aanzienlijk versterken omdat deze sterk gecorreleerd is met de sterke onzekerheidsbronnen, $FNH_{3,dd}$ en $FNO_{x,dd}$.

De toename van de onzekerheidsbijdrage van de CEC en de NH_4 -omwisselconstante in laag 3 (CEC_2 , $KNH_{4,omw,2}$) wordt veroorzaakt door optredende NH_4 -desorptie door de reductie in N-depositie. Om een bijdrage te leveren aan de NO_3 -concentratie dient de vrijgekomen NH_4 te worden genitrificeerd. Dientengevolge neemt ook de onzekerheidsbijdrage van de nitrificatieconstante in laag 2 ($k_{nit,2}$) enigszins toe, zij het met enige vertraging ten opzichte van $KNH_{4,omw,2}$.

Aanvankelijk spelen de onzekerheid in $\text{vFNH}_{4,\text{opn}}$ en k_{nit} ook nog een rol van betekenis in laag 3, maar naarmate de simulatieperiode vordert, neemt de onzekerheidsbijdrage van deze parameters snel af. Dit hangt nauw samen met de door het model overschatte nitrificatie: bij nagenoeg alle uitgevoerde Monte Carlo-simulaties is er tegen het eind van de simulatieperiode geen NH_4 meer aanwezig in laag 3 (par. 5.1.3). Daardoor is de onzekerheidsbijdrage van de parameters die verantwoordelijk zijn voor de verhouding NH_4/NO_3 (o.a. $\text{vFNH}_{4,\text{opn}}$ en k_{nit}) in laag 3, nihil. Als een meer realistische verdeling van k_{nit} was gekozen (zie ook par. 5.1.2), zou de onzekerheidsbijdrage van k_{nit} aan de NO_3 -concentratie in laag 3 groter en daarmee reëler zijn geweest.

In fig. 19 is het verloop van de RTU in de tijd tussen de belangrijkste modelparameters en de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3 weergegeven.

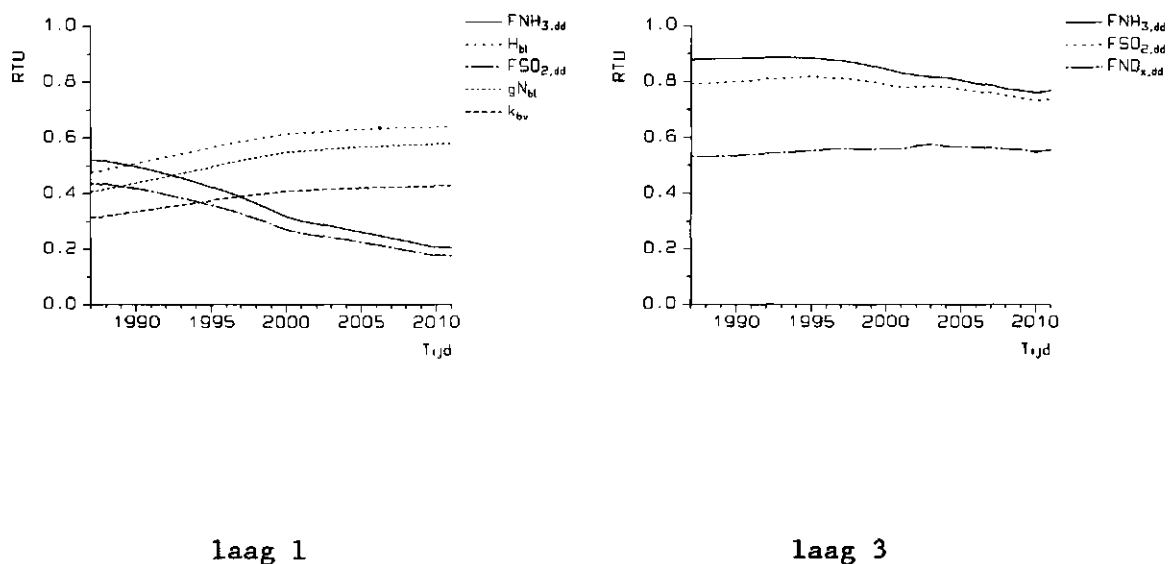


Fig. 19 Verloop van de RTU tussen modelparameters en de NO_3 -concentratie in laag 1 en 3.

De onzekerheidsbijdrage van $\text{FNH}_{3,\text{dd}}$ en $\text{FSO}_{2,\text{dd}}$ aan de NO_3 -concentratie in laag 1 neemt gedurende de simulatie-periode duidelijk af, terwijl de onzekerheidsbijdrage van H_{bl} , gN_{bl} en k_{bv} toeneemt. Dit hangt samen met de toename van het relatieve aandeel van de nutriëntencyclus aan de N-belasting (par. 5.1.2; par. 5.2.2.2). In laag 3 blijkt de onzekerheidsbijdrage van de depositie ($\text{FNH}_{3,\text{dd}}$, $\text{FSO}_{2,\text{dd}}$ en $\text{FNO}_{\text{x,dd}}$) nauwelijks in de tijd te veranderen.

Samenvattend kan worden geconcludeerd dat de onzekerheid in de NO_3 -concentratie in laag 3, en daarmee de uitspoeling onder de wortelzone, in hoge mate wordt bepaald door de onzekerheid in de droge NH_3 -depositie en de daarmee gecorreleerde droge SO_2 -depositie. Dit geldt zowel bij het huidige als bij het gereduceerde depositieniveau. Wat de onzekerheid in modelparameters betreft, draagt de onzekerheid in nitrificatieconstanten in belangrijke mate bij aan de onzekerheid van de NO_3 -uitspoeling. Boven in de wortelzone levert aanvankelijk (1987) de droge NH_3 -depositie de grootste bijdrage aan de onzekerheid, terwijl uiteindelijk voornamelijk de parameters die de nutriëntencyclus beïnvloeden (H_{bl} , gN_{bl} , k_{bv}), de onzekerheid in de NO_3 -concentratie bepalen.

5.2.2.3 Ammonium/kalium-molratio

In tabel 21 zijn de bijdragen van de belangrijkste onzekerheidsbronnen aan de onzekerheid van de NH_4/K -molratio voorspelling in laag 1 en 3 weergegeven voor de jaren 1987, 2000 en 2010.

De onzekerheid in de NH_4/K -molratio in laag 1 wordt voornamelijk bepaald door de onzekerheid in parameters die de NH_4 -concentratie beïnvloeden (o.a. $\text{FNH}_{3,\text{dd}}$, k_{nit} en gN_{bl}), en in mindere mate door parameters die de K-concentratie (o.a. f_{dd} , FK_{dn} en gK_{bl}) beïnvloeden.

Tabel 21 Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010.

Onzekerheids- bron	1987		2000		2010	
	RTU	SRC	RTU	SRC	RTU	SRC
laag 1:						
$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	0,45 (1)	0,37 (2)	0,29 (5)	0,29 (7)	0,18 (11)	0,24 (8)
$\text{FSO}_{2,\text{dd}}$	0,43 (2)	0,08 (16)	0,26 (7)	-0,02 (43)	0,15 (12)	-0,10 (17)
f_{dd}	0,41 (3)	-0,43 (1)	0,40 (1)	-0,41 (1)	0,37 (2)	-0,37 (4)
FK_{dn}	0,34 (4)	-0,35 (3)	0,31 (4)	-0,32 (6)	0,27 (4)	-0,28 (6)
$k_{\text{nit},1}$	0,31 (5)	-0,30 (4)	0,34 (3)	-0,33 (4)	0,33 (3)	-0,32 (5)
g_{bl}^{N}	0,30 (6)	0,30 (5)	0,39 (2)	0,39 (2)	0,44 (1)	0,44 (1)
$\text{FNO}_{\text{x},\text{dd}}$	0,29 (7)	0,06 (23)	0,18 (9)	0,07 (22)	0,10 (19)	0,07 (21)
g_{bl}^{K}	0,28 (8)	-0,28 (6)	0,27 (6)	-0,28 (8)	0,26 (5)	-0,27 (7)
$g_{\text{ox},1}^{\text{Al}}$	0,19 (9)	-0,18 (8)	0,15 (13)	-0,15 (11)	0,13 (15)	-0,13 (13)
k_{bv}	0,12 (10)	0,23 (7)	0,17 (10)	0,33 (5)	0,21 (8)	0,37 (3)
laag 3:						
$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	0,40 (1)	0,22 (4)	0,27 (4)	0,12 (17)	0,16 (7)	0,08 (25)
$\text{FSO}_{2,\text{dd}}$	0,40 (2)	0,21 (6)	0,27 (3)	0,16 (9)	0,15 (9)	0,09 (22)
$k_{\text{nit},2}$	0,35 (3)	-0,36 (1)	0,30 (2)	-0,31 (2)	0,17 (5)	-0,18 (5)
$v\text{fNH}_{4,\text{opn}}$	0,29 (4)	-0,30 (2)	0,26 (5)	-0,26 (4)	0,18 (4)	-0,19 (4)
H_{wt}	0,27 (5)	0,30 (3)	0,34 (1)	0,38 (1)	0,26 (1)	0,30 (1)
$\text{FNO}_{\text{x},\text{dd}}$	0,27 (6)	0,00 (73)	0,19 (8)	-0,01 (68)	0,09 (26)	-0,05 (41)
$k_{\text{nit},1}$	0,22 (7)	-0,21 (5)	0,20 (7)	-0,20 (6)	0,13 (13)	-0,14 (10)
k_{K_v}	0,21 (8)	-0,19 (8)	0,15 (13)	-0,14 (12)	0,07 (35)	-0,07 (31)
$k_{\text{nit},3}$	0,19 (9)	-0,18 (9)	0,17 (10)	-0,16 (8)	0,12 (14)	-0,12 (11)
FK_{dn}	0,19 (10)	-0,19 (7)	0,10 (23)	-0,11 (21)	0,02 (68)	-0,02 (66)
H_{bl}	0,13 (15)	-0,17 (10)	0,21 (6)	-0,28 (3)	0,23 (2)	-0,30 (2)
$\text{KNH}_{4,\text{omw},3}$	0,05 (38)	-0,01 (65)	0,17 (11)	0,20 (5)	0,20 (3)	0,24 (3)

Een hogere FK_{dn} en gK_{b1} heeft uiteraard een lagere NH_4/K -molratio (hogere K-concentratie) tot gevolg, wat tot uiting komt in een negatieve SRC, terwijl een hogere $FNH_{3,dd}$ in een hogere NH_4/K -molratio resulteert (positieve SRC). Evenals bij de NO_3^- concentratie heeft ook hier de droge depositie van SO_2 ($FSO_{2,dd}$), volgens de RTU, een grote invloed op de NH_4/K -molratio. Dit is een "artefact" dat grotendeels het gevolg is van de ingebrachte correlatie met de droge NH_3 -depositie ($FNH_{3,dd}$).

In tegenstelling tot laag 1 wordt de onzekerheid van de NH_4/K -molratio in laag 3 voornamelijk bepaald door parameters, die de NH_4 -concentratie beïnvloeden (o.a. $FNH_{3,dd}$ en k_{nit}) en niet of nauwelijks door parameters die de K-concentratie beïnvloeden. In het begin van de simulatie-periode levert met name de depositie ($FNH_{3,dd}$ en alleen op basis van de RTU, $FSO_{2,dd}$) de grootste onzekerheidsbijdrage, terwijl dit aan het eind parameters zijn die de N-cyclus via de vegetatie beïnvloeden (H_{wt} en H_{b1}). Tevens levert de NH_4 -omwisselconstante ($KNH_{4,omw}$) aan het eind van de simulatie-periode een bijdrage aan de onzekerheid in laag 3. Opvallend is dat in het begin van de simulatie-periode de K-verweringsconstante (kKv) ook enige invloed uitoefent op de onzekerheid van de NH_4/K -molratio in deze laag.

N.B. Bij de resultaten in laag 3 dient te worden bedacht dat de fit van het regressie-model aan het eind van de simulatie-periode, aanzienlijk verslechterd.

In fig. 20 is het verloop van de RTU in de tijd tussen de belangrijkste modelparameters en de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 weergegeven.

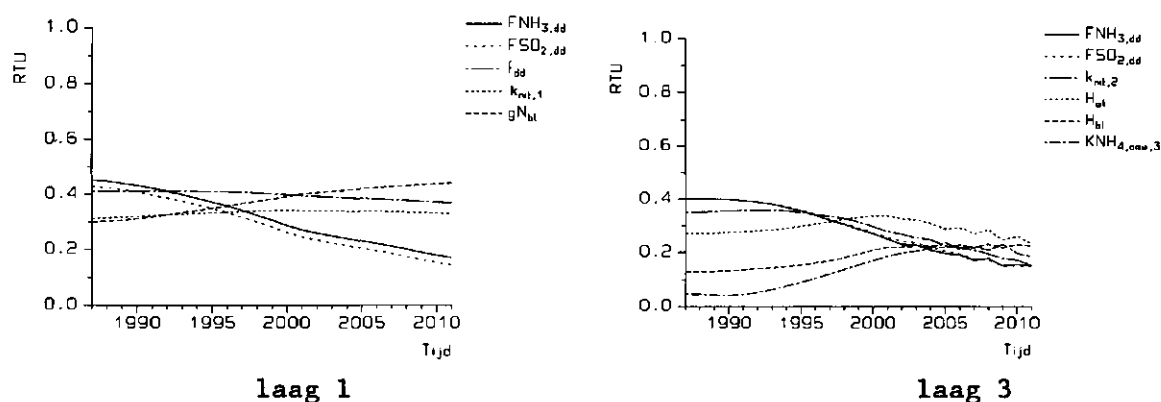


Fig. 20 Verloop van de RTU tussen modelparameters en de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3.

Evenals bij de NO_3 -concentratie in laag 1 neemt bij de NH_4/K -molratio in deze laag de onzekerheidsbijdrage van de NH_3 -depositie duidelijk af gedurende de simulatie-periode, terwijl de onzekerheidsbijdrage van de parameters die de N-cyclus via de vegetatie beïnvloeden (met name $g\text{N}_{bl}$) toeneemt. In laag 3 is een soortgelijke trend te zien.

Bij de analyse in laag 3 dient te worden aangetekend dat de RTU- en SRC-waarden na het jaar 2000 geen adequate beschrijving voor de onzekerheidsbijdrage leveren, omdat er sprake is van een lage COD (par. 5.2.1). De slechte fit van het lineaire regressie-model wordt zeer waarschijnlijk veroorzaakt doordat bijna alle Monte Carlo-simulaties een waarde van ca. 0 opleveren voor de NH_4/K -molratio (overschatting van de nitrificatie; par. 5.1.3 en 5.2.2.2) en slechts enkele simulaties relatief flinke uitschieters opleveren (fig. 17).

Samenvattend bepalen de onzekerheid in N-depositie, parameters die de N-cyclus via de vegetatie beïnvloeden en de nitrificatie constanten de onzekerheid in de NH_4/K -molratio in laag 1 en 3 bepalen. Parameters die van invloed zijn op de K-concentratie

leveren alleen in laag 1 een belangrijke bijdrage aan de onzekerheid van de NH_4/K -molratio.

5.2.2.4 Aluminium/calcium-molratio

In tegenstelling tot de overige hier geanalyseerde modeluitgangen is, ten gevolge van de slechte fit van het lineaire regressie-model op de oorspronkelijke data, voor de Al/Ca-molratio in laag 3 gebruik gemaakt van de ranggetransformeerde data (par. 5.2.1). Als tweede onzekerheidsmaat is daarom niet de SRC maar de lineaire correlatie coëfficiënt voor ranggetransformeerde data (LRCC) aan de tabel toegevoegd.

In tabel 22 zijn de bijdragen van de belangrijkste onzekerheidsbronnen aan de onzekerheid van de Al/Ca-molratio voorspelling in laag 1 en 3 weergegeven voor de jaren 1987, 2000 en 2010.

De onzekerheid in de Al/Ca-molratio in laag 1 wordt onder andere bepaald door $g\text{Al}_{\text{ox},1}$, $k\text{Al}_{\text{v,ox}}$, FCa_{dn} en $g\text{Ca}_{\text{bl}}$. De relatie tussen de Al/Ca-molratio en deze parameters ligt voor de hand. Een verhoging van $g\text{Al}_{\text{ox},1}$ levert een hogere Al-concentratie en derhalve een hogere Al/Ca-molratio ($\text{SRC} > 0$). Daarentegen levert een hoog Ca-gehalte in de naalden ($g\text{Ca}_{\text{bl}}$) en een grotere Ca-depositie een hogere Ca-concentratie en daarmee lagere Al/Ca-molratio ($\text{SRC} < 0$). De onzekerheidsbijdrage van $g\text{Al}_{\text{ox},1}$ blijkt toe te nemen in de tijd, terwijl $k\text{Al}_{\text{v,ox},1}$ iets afneemt. De onzekerheidsbijdragen van FCa_{dn} en $g\text{Ca}_{\text{bl}}$ blijven gedurende de simulatieperiode vrijwel constant.

Tabel 22 Rangschikking van de bijdrage van onzekerheidsbronnen aan de Al/Ca-molratio in laag 1 en 3 op de tijdstippen 1987, 2000 en 2010.

Onzekerheids- bron	1987		2000		2010	
	RTU	SRG	RTU	SRG	RTU	SRG
laag 1:						
$gAl_{ox,1}$	0,53 (1)	0,54 (1)	0,56 (1)	0,56 (1)	0,58 (1)	0,58 (1)
FCa_{dn}	0,37 (2)	-0,36 (2)	0,37 (2)	-0,36 (2)	0,37 (2)	-0,37 (2)
gCa_{bl}	0,31 (3)	-0,31 (3)	0,30 (3)	-0,30 (3)	0,31 (3)	-0,32 (3)
$f_{wt,1}$	0,31 (4)	0,28 (5)	0,28 (4)	0,26 (5)	0,23 (5)	0,20 (5)
$kAl_{ox,1}$	0,31 (5)	0,29 (4)	0,26 (6)	0,24 (6)	0,22 (6)	0,20 (6)
f_{dd}	0,26 (6)	-0,27 (6)	0,26 (4)	-0,28 (4)	0,26 (4)	-0,27 (4)
$f_{wt,2}$	0,21 (7)	-0,02 (46)	0,19 (7)	-0,01 (49)	0,16 (7)	-0,03 (39)
H_{bl}	0,18 (8)	-0,19 (7)	0,17 (8)	-0,15 (7)	0,14 (9)	-0,07 (18)
$FSO_{2,dd}$	0,16 (9)	0,04 (29)	0,12 (10)	0,05 (24)	0,07 (21)	0,01 (66)
$FNH_{3,dd}$	0,15 (10)	0,10 (9)	0,11 (14)	0,05 (14)	0,06 (26)	0,05 (28)
Onzekerheids- bron	1987		2000		2010	
	SRRC	LRCC	SRRC	LRCC	SRRC	LRCC
laag 3:						
FCa_{dn}	-0,69 (1)	-0,67 (1)	-0,67 (1)	-0,64 (1)	-0,61 (1)	-0,57 (1)
f_{dd}	-0,46 (2)	-0,42 (2)	-0,46 (2)	-0,42 (2)	-0,44 (2)	-0,40 (2)
kCa_v	-0,36 (3)	-0,36 (3)	-0,38 (3)	-0,38 (3)	-0,36 (3)	-0,36 (3)
$FSO_{2,dd}$	0,20 (4)	0,33 (4)	0,17 (4)	0,29 (4)	0,17 (6)	0,29 (4)
$FNH_{3,dd}$	0,17 (5)	0,33 (5)	0,16 (5)	0,29 (5)	0,13 (9)	0,27 (5)
gCa_{st}	0,14 (6)	0,14 (7)	0,15 (6)	0,15 (7)	0,14 (7)	0,14 (9)
FCI_{dn}	0,08 (7)	0,08 (9)	0,12 (9)	0,09 (10)	0,24 (4)	0,16 (8)
$k_{nit,1}$	0,08 (8)	0,05 (14)	0,04 (25)	0,01 (64)	0,00 (67)	-0,03 (43)
$vfNH_{4,opn}$	0,08 (9)	0,05 (18)	0,04 (24)	0,00 (73)	0,01 (63)	-0,03 (36)
$k_{nit,2}$	0,07 (10)	0,05 (13)	0,02 (39)	0,00 (74)	0,00 (74)	-0,02 (53)

Opvallend is dat de wortelfractie in laag 1 ($f_{wt,1}$) ook een redelijke bijdrage aan de onzekerheid levert. Een grotere $f_{wt,1}$ resulteert in een grotere nutriëntenopname in laag 1. Dit heeft enerzijds tot gevolg dat de Ca-concentratie in laag 1 daalt. Anderzijds draagt een grotere nutriëntenopname bij tot een grotere H-belasting. Er worden door de vegetatie namelijk meer kationen dan anionen opgenomen. Dit wordt gecompenseerd door uitstoot van protonen (in het model via de ionenbalans). De grotere H-belasting zorgt voor een toename van de Al-verwerking en daarmee tot een toename van de Al-concentratie. Beide effecten resulteren in een grotere Al/Ca-molratio (positieve SRC). Ook de wortelfractie in laag 2 ($f_{wt,2}$) levert een bijdrage aan de onzekerheid in de Al/Ca-molratio in laag 1 als gevolg van de opgelegde (negatieve) correlatie met $f_{wt,1}$ (tabel 14). Dit komt eveneens tot uiting in het verschil tussen de RTU en de absolute waarde van de SRC.

Aan de onderkant van de wortelzone levert met name de onzekerheid in de Ca-depositie (FCa_{dn} en f_{dd}) de grootste bijdrage aan de onzekerheid in de Al/Ca-molratio. Daarnaast spelen de Ca-verweringsconstante (kCa_v) en het Ca-gehalte in de stammen (gCA_{st}) een rol van betekenis. Opvallend is dat de onzekerheid in de zure depositie input ($FSO_{2,dd}$ en $FNH_{3,dd}$) in mindere mate verantwoordelijk is voor de onzekerheid in de Al/Ca-molratio in laag 3.

In laag 3 leveren aanvankelijk ook de nitrificatieconstanten in laag 1 en 2 een geringe bijdrage aan de onzekerheid in de Al/Ca-molratio middels de invloed van de nitrificatie op de H-produktie. Bij een hogere nitrificatieconstante wordt meer H geproduceerd, wat een grotere Al-verwerking veroorzaakt, hetgeen een hogere Al/Ca-molratio oplevert ($SRRC > 0$).

In fig. 21 is het verloop van de SRRC in de tijd tussen de belangrijkste modelparameters en de Al/Ca-molratio in laag 1 en 3 weergegeven.

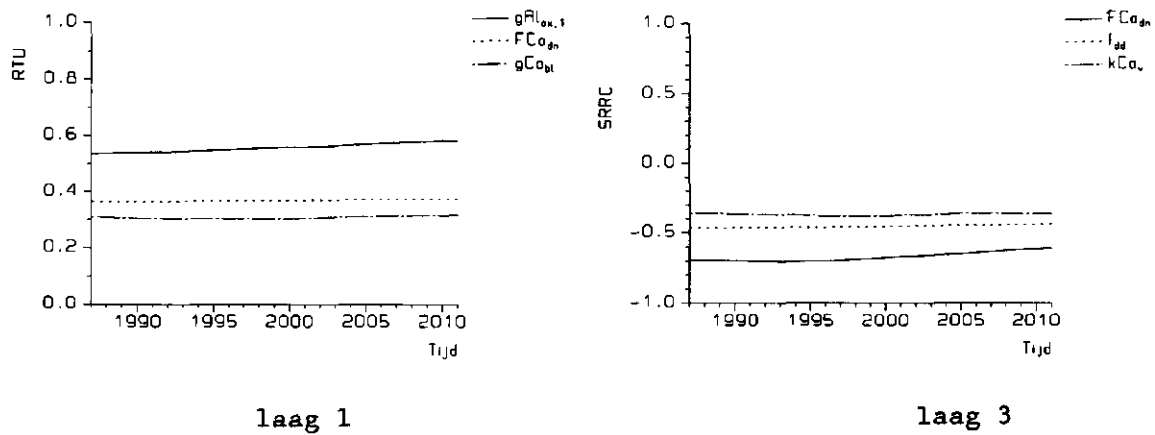


Fig. 21 Verloop van de RTU en de SRRC tussen modelparameters en de Al/Ca-molratio in resp. laag 1 en 3.

Uit fig. 21 blijkt dat de onzekerheidsbijdrage van $gAl_{ox,1}$ toeneemt in de tijd, doordat de voorraad aan Al-hydroxiden afneemt in de tijd als gevolg van verwerking. Hierdoor wordt de relatieve afname van gAl_{ox} in de tijd steeds groter. Omdat de Al-verwerking evenredig is met gAl_{ox} (zie ook de Vries en Kros, 1989) resulteert dit in een grotere bijdrage van deze parameter aan de onzekerheid in de Al-verwerking en daarmee ook aan de onzekerheid in de Al/Ca-molratio met de tijd. Wanneer simulaties worden uitgevoerd over een periode van 100 jaar (de Vries en Kros, 1989) zal de onzekerheid in de Al/Ca-molratio bijna volledig worden bepaald door de onzekerheid in gAl_{ox} . De onzekerheidsbijdrage van FCa_{dn} en gCa_{bl} blijft min of meer constant.

Gedurende de simulatie-periode verandert de onzekerheidsbijdrage van de Ca-depositie (f_{dd} en fCa_{dw}) nauwelijks in laag 3. Dit heeft waarschijnlijk deels te maken met het feit dat de depositie van basische kationen gedurende de simulatie constant is verondersteld. Onduidelijk is of dit een reële aanname is bij een afnemende zure depositie. Net als de bijdrage van de Ca-depositie blijft ook de onzekerheidsbijdrage van de Ca-verweringsconstante (kCa_v) constant.

Samenvattend wordt de onzekerheid in de Al/Ca-molratio aan de onderkant van de wortelzone voornamelijk bepaald door de Ca-depositie en de Ca-verweringsconstante (kCa_v) en in mindere mate door de zure depositie ($FSO_{2,dd}$ en $FNH_{3,dd}$). Boven in het profiel bepaalt voornamelijk het Al-hydroxidegehalte de onzekerheid in de Al/Ca-molratio en in mindere mate de Ca-depositie.

5.2.3 Conclusies

In tabel 23 zijn de inputs, parameters en variabelen gegeven die, op volgorde van belangrijkheid, de grootste bijdrage leveren aan de onzekerheid van alle hier beschouwde modeluitgangen. Hierbij is onderscheid gemaakt naar bodemlaag, hoogte van de depositie (aan het begin van de simulatie-periode hoog, aan het eind laag) en modeluitgang.

Wanneer de depositie (input) buiten beschouwing wordt gelaten leveren de volgende parameters de grootste onzekerheidsbijdrage:

- Al- en pH-dynamiek : gAl_{ox} , k_{gibb} , CEC
- N-dynamiek : gN_{bl} , k_{nit} , H_{wt} , H_{bl} , CEC, $KNH_{4,omw}$
- Ca/K-dynamiek : gCa_{bl} , gK_{bl} , kCa_v , kK_v , KCa_{omw}

Vergelijking met de veldgegevens laat zien dat het model de NH_4/K -molratio onderschat en de Al/Ca-molratio overschat. Dit is een calibratie-probleem (van met name k_{nit}), waarnaar in de naaste toekomst nader onderzoek zal worden gedaan.

Tabel 23 De belangrijkste onzekerheidsbronnen voor de pH, NO_3 -concentratie, NH_4/K - en Al/Ca - molratio in laag 1 en 3 aan het begin (1987) en eind (2010) van de simulatie-periode.

Uitgang	pH		NO_3		NH_4/K		Al/Ca	
	begin	eind	begin	eind	begin	eind	begin	eind
laag 1	$g\text{Al}_{\text{ox},1}$	$g\text{Al}_{\text{ox},1}$	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	H_{bl}	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	$g\text{N}_{\text{bl}}$	$g\text{Al}_{\text{ox},1}$	$g\text{Al}_{\text{ox},1}$
	$\text{FSO}_{2,\text{dd}}$	$g\text{N}_{\text{bl}}$	H_{bl}	$g\text{N}_{\text{bl}}$	$(\text{FSO}_{2,\text{dd}})$	f_{dd}	FCa_{dn}	FCa_{dn}
	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	CEC_1	$\text{FSO}_{2,\text{dd}}$	k_{bv}	f_{dd}	$k_{\text{nit},1}$	$g\text{Ca}_{\text{bl}}$	$g\text{Ca}_{\text{bl}}$
laag 3	K_{gibb}	K_{gibb}	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	H_{wt}	FCa_{dn}	FCa_{dn}
	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	$\text{FNH}_{3,\text{dd}}$	$(\text{FSO}_{2,\text{dd}})$	$(\text{FSO}_{2,\text{dd}})$	$\text{FSO}_{2,\text{dd}}$	H_{bl}	f_{dd}	f_{dd}
	$(\text{FSO}_{2,\text{dd}})^*$	$(\text{FSO}_{2,\text{dd}})$	$\text{FNO}_{\text{x},\text{dd}}$	$\text{FNO}_{\text{x},\text{dd}}$	$k_{\text{nit},2}$	$\text{KNH}_{4,\text{omw}}$	$k\text{Ca}_{\text{v}}$	$k\text{Ca}_{\text{v}}$

* De onzekerheidsbronnen waarbij de RTU sterk verschilt van de SRC (par. 5.2.2.1) zijn tussen () geplaatst.

6 CONCLUSIES EN SLOTOPMERKINGEN

Uit deze studie kunnen de volgende conclusies worden getrokken:

1. Een afname in atmosferische depositie komt vrijwel direct tot uiting in elementconcentraties (en molratio's). Dit betreft met name een afname van de NO_3 -concentratie, NH_4/K -molratio en Al/Ca -molratio en in mindere mate een pH-stijging. Bij een niet stationaire nutriëntenkringloop zullen die effecten nog sterker zijn. De aanname van een stationaire nutriëntencyclus leidt in het jaar 2010 waarschijnlijk tot een overschatting van de NH_4/K -, Al/Ca -molratio en de NO_3 -concentratie en een onderschatting van de pH.
2. De onzekerheid in modeluitkomsten hangt sterk af van de modeluitgang en het beschouwde bodemcompartiment en is:
 - relatief groot voor de NH_4/K -molratio, de Al/Ca -molratio (hoge variatie-coëfficiënt);
 - relatief klein voor de pH en NO_3 -concentratie (lage variatie-coëfficiënt);
 - voor zowel de molratio's als de pH en NO_3 -concentratie relatief groter in de ondergrond dan in de bovengrond.
3. De bijdrage van onzekerheidsbronnen aan modeluitkomsten hangt af van de modeluitgang, de beschouwde bodemlaag en het beschouwde tijdstip. Deze studie heeft betrekking op relatief korte-termijngedrag (tot 2010). De conclusies met betrekking tot de onzekerheid hoeven dus niet geldig te zijn voor het langere termijngedrag. Algemeen geldt dat de inputs parameters en variabelen die de dynamiek van N (N-depositie, N-gehaltes in naalden en nitrificatieconstante) en Al (hoeveelheid Al-hydroxide en evenwichtsconstante) bepalen, een belangrijke rol spelen bij de beschouwde modeluitgangen.
4. In het algemeen komen de modeluitkomsten van één simulatie met gemiddelde parameter-instellingen goed overeen met het

gemiddelde van de modeluitkomsten van alle Monte Carlo-simulaties. Dit hangt samen met het lineaire modelgedrag voor de meeste modeluitgangen, wat blijkt uit de hoge waarde van de COD van de lineaire regressie-modellen. Voor het verkrijgen van gebiedsgemiddelde waarden, bij een later uit te voeren regionale toepassing op nationale schaal, lijkt het gebruik van gebiedsgemiddelde parameterwaarden gerechtvaardigd.

5. Metamodellen die de relatie tussen modeluitgang en modelinputs op één tijdstip karakteriseren (bijv. regressie-modellen) zijn minder geschikt vanwege het tijdsafhankelijke karakter van de relatie in samenhang met het depositiescenario (zie ook slotopmerking 6).

Enkele slotopmerkingen:

1. Dit rapport beschrijft enkele resultaten van een eerste onzekerheidsanalyse op RESAM. Deze analyse heeft een voorlopig karakter omdat de beschrijving van onzekerheden nog niet helemaal volledig en correct is. Voorzichtigheid met het trekken van conclusies is dus geboden.
2. Onzekerheidsanalyse geeft alleen een beeld van de model-onzekerheden onder de gebruikte veronderstellingen. Dit betreft o.a. de kansverdeling en de onderlinge correlaties van de onzekerheidsbronnen. De mate van betrouwbaarheid van de resultaten zal dus afhangen van de mate waarin aan deze veronderstellingen voldaan is.
Een robuustheidsanalyse die de ongevoeligheid van de resultaten voor de gebruikte aannamen onderzoekt, is tegen deze achtergrond onmisbaar. In deze studie werd echter nog geen robuustheidsstudie uitgevoerd.
3. Uiteindelijk wordt een onzekerheidsanalyse op het totale DAS-model beoogd. Ten gevolge van de complexiteit van dit totale

model wordt er allereerst een onzekerheidsanalyse op de deelmodellen uitgevoerd. Hierbij moet wel bedacht worden dat de resultaten en hun consequenties in feite in het licht gezien moeten worden van het totaalmodel. Zo kan het voorkomen dat grote onzekerheden in deelmodellen slechts een geringe rol spelen in het totaalmodel. Het omgekeerde kan ook het geval zijn. Het is belangrijk om hiermee rekening te houden indien we op basis van onze resultaten het deelmodel verder willen aanpassen. Zo kan voorkomen worden dat er (voor het totaalmodel) nutteloze inspanning geleverd wordt bij aanpassing van de deelmodellen.

4. Bij de Monte Carlo-simulaties is een redelijk groot aantal runs gebruikt (250). We kunnen bij Latin Hypercube Sampling echter volstaan met minder runs.
5. Toekomstige aandachtspunten met betrekking tot onzekerheidsanalyse van het bodemverzuringmodel RESAM zijn:
 - gebruik van "filtering"-technieken (Kämäri et. al., 1986) ter reductie van onzekerheid in modelresultaten;
 - uitvoeren van een regionale calibratie waarbij de nitrificatieconstante centraal staat;
 - onzekerheidsanalyse op vollediger model waarin o.a. de hydrologie expliciet is ingebracht teneinde de invloed van seizoensvariaties op de onzekerheid in lange-termijn voorspellingen vast te stellen;
 - gevolgen bekijken van onzekerheid in modelstructuur en modeloperatie;
 - gebruik van geschikte data-transformatie en/of hogere orde regressie-model voor data die sterke niet-lineairiteiten vertonen.
6. De tijdsafhankelijkheid van de bijdrage van parameters en variabelen aan de onzekerheid in modeluitkomsten heeft gevolgen voor een eventueel verdere modelvereenvoudiging. Het gebruik van metamodellen hiervoor, zie bijv. Rotmans et al.

(1988), lijkt minder geschikt, omdat hiermee in feite slechts de relatie tussen parameters/variabelen en de modeluitgang op één tijdstip wordt bestudeerd (en bij een vast modelingangs-scenario). Door het hierboven geconstateerde tijdafhankelijke karakter van deze relatie zal veelal voor elk tijdstip (en voor elk ander ingangs-scenario) een nieuw metamodel geconstrueerd dienen te worden. Tevens zit de invloed van de modelingangen (bijv. het depositiescenario) vaak slechts impliciet in zo'n metamodel geïncorporeerd (via de coëfficiënten), waardoor het zicht op deze invloed niet duidelijk tot uiting komt. Dit alles maakt deze aanpak minder toepasbaar, vooral indien voor veel toepassingen (bijv. scenario-analyse) de behoefte zal bestaan aan een eenvoudiger (dynamisch) model dat het (dynamisch) gedrag van het oorspronkelijk complexe model geschikt zal benaderen voor een klasse van modelingangs-scenario's, en voor een range van te verwachten parameterwaarden en beginvoorwaarden. In dit kader zal de voorkeur uitgaan naar modelreductie-methoden die vereenvoudigde dynamische modellen opleveren, waarin de invloed van de modelingangs-scenario's expliciet naar voren komt. Dit is echter een nog grotendeels onontgonnen onderzoeksgebied, met name voor niet-lineaire modellen die zich in de praktijk veelal voordoen. Standaardtechnieken zijn er vooralsnog nauwelijks te geven. Het vinden van een geschikt gereduceerd model zal grotendeels een kwestie zijn van inventiviteit, creativiteit en inzicht van de onderzoeker. De resultaten van onzekerheidsanalyse kunnen hierbij de weg wijzen (Hettelingh en Gardner, 1988).

7 LITERATUUR

- Adema, E.H., P. Heeres and H. Hulskotte, 1986. On the dry deposition of NH_3 , SO_2 and NO_2 on wet surfaces in a small scale windtunnel. In: Proc. Clean Air Congress, Sydney, Australia, 25-29 August 1986, Vol. II: 1-14.
- Alcamo, J. and J. Bartnicki, 1985. An approach to uncertainty of a long range air pollutant transport model. Working Paper WP-85-88, Laxenburg, Austria, IIASA.
- Alcamo, J. and J. Bartnicki, 1987. A framework for error analysis of a long-range transport model with emphasis on parameter uncertainty. *Atmospheric Environment*, 21: 2121-2131.
- Anonymus, 1985. Chemische samenstelling van de neerslag in Nederland; Jaarrapport 1985. Bilthoven, Rapport nr. KNMI 156-8 / RIVM 228703001.
- Booy, C.G., L.W.A. van Hove en E.H. Adema, 1987. Expositie-respons-relatie modellen en onderzoek naar de opname van ammoniak door bladeren. Landbouwniversiteit Wageningen, Vakgroep Luchthygiëne en -verontreiniging. Rapport R-265.
- Bredemeier, M., 1988. Forest canopy transformation of atmospheric deposition. *Water, Air and Soil Pollut.* 40: 121-138.
- Breemen, N. van, W.F.J. Visser and Th. Pape, 1988. Biochemistry of an oak-woodland ecosystem in the Netherlands affected by acid atmospheric deposition. Wageningen, PUDOC. Agricultural Research Report 930.
- Burg, J. van den en H.P. Kiewit, 1989. Veebezetting en de naald-samenstelling van grove den, Douglas en Corsicaanse den in het Peelgebied in de periode 1956 t/m 1988; een onderzoek naar de betekenis van de veebezetting voor het optreden van bosschade. Wageningen, Dorschkamp. Rapport 559.
- Conover, W.J., 1971. *Practical Nonparametric Statistics*. New York, John Wiley and Sons, Inc.

- Cosby, B.J., G.M. Hornberger, R.F. Wright and J.N. Galloway, 1986. Modelling the effects of acid deposition: Control of long-term sulfate dynamics by soil sulfate adsorption. *Water Res. Res.* 22: 1283-1291.
- Crick, M.J., M.D. Hill and D. Charles, 1987. The role of sensitivity analysis in assessing uncertainty. NEA Workshop. "Uncertainty Analysis for System Performance Assessment", Seattle, 24-26 February, 1987.
- Dale, V.H., H.I. Jager, R.H. Gardner and A.E. Rosèn, 1988. Using sensitivity and uncertainty analyses to improve predictions of broad-scale forest development. *Ecol. Modeling*, Vol. 42: 165-178.
- Dobben, H., J. Mulder, H. van Dam and H. Houweling, i.v. The impact of acid atmospheric deposition on the biogeochemistry of moorland pools and surrounding terrestrial environment. Arnhem, RIN.
- Downing, D.J., R.H. Gardner and F.O.H. Hoffman, 1985. An examination of response-surface methodologies for uncertainty analysis in assessment models. *Technometrics*, Vol. 27: 151-163.
- Draper, N. and H. Smith, 1981. *Applied Regression Analysis*. New York, Second Edition, John Wiley and Sons, Inc.
- Duijsings, J.J.H.M., J.M. Verstraten, L. Bruynzeel and W. Bouten, 1986. Relationships between precipitation chemistry and some meteorological parameters in the Netherlands; a statistical evaluation. *Water, Air and Soil Pollut.* 28: 213-223.
- Erisman, J.W., F.A.A.M. de Leeuw en R.M. van Aalst, 1987. Depositie van de voor verzuring in Nederland belangrijkste componenten in de jaren 1980 t/m 1986. Bilthoven, RIVM, Rapport nr. 228473001.
- Gardner, R.H., B. Røjder and U. Bergström, 1983. PRISM: A systematic method for determining the effect of parameter uncertainties on model prediction. Nyköping, Zweden, Studsvik Energiteknik Ab, Report/NW-83/555.

- Grinsven, J.J.M. van, 1988. Impact of acid atmospheric deposition on soils; quantification of chemical and hydrologic processes. Wageningen, Proefschrift Landbouwniversiteit.
- Hettelingh, J.P. and R.H. Gardner, 1988. The trade off between the complexity, input data and scale of application of the RainsLake-Model; a statistical analysis. Proceedings of the 81th annual meeting of APCA Dalas, Texas, June 19-24, 1988.
- Hettelingh, J.P., 1989. Uncertainty in modeling regional environmental systems; the generalization of a watershed acidification model for predicting broad scale effects. Amsterdam, Proefschrift Vrije Universiteit.
- Hoekstra, C. en J.N.B. Poelman, 1982. Dichtheid van gronden gemeten aan de meest voorkomende bodemeenheden in Nederland. Wageningen, STIBOKA, Rapport 1582.
- Hoffman, F.O. and R.H. Gardner, 1983. Evaluation of uncertainties in environmental radiological assessment models. pp.: 11-1, 11-55. In: Radiological Assessment: A Textbook on Environmental Dose Assessment. Eds.: J.E. Till en H.R. Meyer. United States Nuclear Regulatory Commission, Washington, D.C. NUREG/CR-3332, ORNL-5968.
- Hornberger, G.M., and R.C. Spear, 1981. An approach to the preliminary analysis of environmental systems. J. Environ. Management, 12: 7-18.
- Hornberger, G.M., B.J. Cosby and J.N. Galloway, 1986. Modelling the effects of acid deposition: uncertainty and spatial variability in estimation of long-term sulphate dynamics in a region. Water Res. Res. 22: 1293-1302.
- Houdijk, A.L.F.M., 1988. De depositie van verzurende stoffen in het Nederlandse bos bepaald aan de hand van doorvalmetingen. Nijmegen, Katholieke Universiteit, Vakgroep Aquatische Oecologie en Biogeologie.
- Iman, R.L. and W.J. Conover, 1980. Small sample sensitivity analysis techniques for computer model, with an application to risk assessment. Communications in Statistics, A 9: 1749-1842. Rejoinder to comments, *ibid.*: 1863-1974.

- Iman, R.L., J.C. Helton and J.W. Campbell, 1981a. An approach to sensitivity analysis of computer models. Part 1: Introduction, input variable selection and preliminary variable assessment. *Journal of Quality Technology*, 13: 174-183.
- Iman, R.L., J.C. Helton and J.W. Campbell, 1981b. An approach to sensitivity analysis of computer models. Part 2: Ranking of input variables, response surface validation, distribution effect and technique synopsis. *Journal of Quality Technology*, 13: 232-240
- Iman, R.L. and W.J. Conover, 1982. A distribution free approach to inducing rank correlations among input variables. *Communications in Statistics*, B 11: 311-334.
- Iman, R.L. and J.H. Helton, 1985. A comparison of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. New Mexico, Albuquerque, Sandi National Laboratories, NUREGICR-3904, SAND 84-1461.
- Iman, R.L. and J.H. Helton, 1988. An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Analysis*, 8: 71-90
- Ivens, W.P.M.F., G.P.J. Draayers, M.M. Bos and W. Bleuten, 1988. Dutch forests as air pollutant sinks in agricultural areas. A case study in the central part of the Netherlands on the spatial and temporal variability of atmospheric deposition to forests. Dutch Priority Programme on Acidification, Report 37-09.
- Ivens, W.P.M.F., 1989. Ruimtelijke variabiliteit van de atmosferische depositie van verzurende en eutrofiërende stoffen in Nederlandse bossen. *Geografisch Tijdschrift* (in druk).
- Janssen, P.H.M., W. Slob en J. Rotmans, 1990. Gevoeligheidsanalyse en onzekerheidsanalyse; een inventarisatie van ideeën methoden en technieken uit de literatuur. Bilthoven, RIVM, Rapport.
- Johnson, D.W. and D.E. Todd, 1983. Some relationships among Fe, Al, C and SO₄ in a variety of forest soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 47: 792-800.

- Kalisz, P.J. and E.L. Stone, 1980. Cation exchange capacity of acid forest humus layers. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44: 407-413.
- Kämäri, J., M. Posch, R.H. Gardner and J.P. Hettelingh, 1986. A model for analysing lake water acidification on a large regional scale. Part 2: regional application. Laxenburg, Austria, IIASA, Working paper-86-66.
- Kimmings, J.P., D. Brinkley, L. Chartapaul and J. de Catanzaro, 1985. Biochemistry of temperate forest ecosystems: Literature on inventories and dynamics of biomass and nutrients. Petawawa National Forestry Institute, Information Report PI-X-47E/F.
- Kinnison, R.R., 1988. Simulation sensitivity analysis using Latin Hypercube sampling, or something new and exciting in the statistics of simulation. Technical paper.
- Kleijn, C.E., G. Zuidema en W. de Vries, 1989. De indirecte effecten van atmosferische depositie op de vitaliteit van Nederlandse bossen. 2. Depositie, bodemeigenschappen en bodemvochtsamenstelling van acht Douglasopstanden. Wageningen, STIBOKA, Rapport 2050.
- Kros, J., W. de Vries, C.I. Bak en C. van de Salm, i.v. Model documentation of RESAM: a Regional Soil Acidification Model.
- Lindsay, W.L., 1979. Chemical equilibria in soils. New York, John Wiley and Sons.
- May, H.M., P.A. Helmke and M.L. Jackson, 1979. Gibbsite solubility and thermodynamic properties of hydroxy-aluminium ions in aqueous solutions at 25: *C. Geochem. Cosmochim. Acta.* 43: 861-868
- Marquardt, D.W. and R. Snee, 1975. Ridge regression in practice. *The American Statistician*, 29: 3-20.
- McKay, M.A., R.J. Beckmann and W.J. Conover, 1979. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 21: 239-245.
- McWilliams, T.P., 1987. Sensitivity analysis of geological computer models: a formal procedure based on Latin Hypercube Sampling. *Mathematical Geology*, 19: 81-90.
- Mulder, J., 1988. Impact of acid atmospheric deposition on soils:

- Mulder, J., 1988. Impact of acid atmospheric deposition on soils: Field monitoring and aluminium chemistry. Wageningen, Proefschrift Landbouwniversiteit.
- Oterdoom, H., W. de Vries en R. Postma, 1990. De indirecte effecten van atmosferische depositie op de vitaliteit van Nederlandse bossen. 3. Karakterisering van de vitaliteit, naaldsamenstelling, groei en beworteling van het bodemprofiel van acht Douglasopstanden. Wageningen, De Dorschkamp.
- Rotmans, J., O.J. Vrieze, G.H.J.C. Peek en W.N.G.M. Veraart, 1988. Experimenteel ontwerp ten behoeve van metamodeltering van een CO₂ simulatie-model. Bilthoven, RIVM, Rapport 758471003.
- Saltelli, A. and J. Marivoet, 1986. Performances of nonparametric statistics in sensitivity and analysis and parameter ranking. Report EUR 10851 EN.
- Santantonio, D. and R.K. Hermann, 1985. Standing crop, production and turnover of fine roots and dry, moderate and wet sites of nature Douglas-fir in westeon Oregon, Ann. Sci. For. 2; 113-142.
- Schneider, T. en A.H.M. Bresser, 1988. Additioneel Programma Verzuring. Evaluatierapport Verzuring. Nr. 00-06. Bilthoven, RIVM.
- Seber, G.A.F., 1977. Linear Regression Analysis. New York, John Wiley and Sons, Inc.
- Stams, A.J.M., 1988. Rol van microbiële processen in de stikstof huishouding van bosgronden. Verslag van het onderzoek naar nitrificatie in zure bosgronden. Project 10 van het Verzuringsonderzoek.
- Tietema, A. and J.M. Verstraten, 1988. The nitrogen budget of an oak-beech forest ecosystem in the Netherlands in relation to atmospheric deposition. Dutch Priority Programme on Acidification, Report 04-01.
- Tiktak, A., C.J.M. Konsten, R. van der Maas and W. Bouten, 1988. Soil chemistry and physis of two Douglas-fir stands affected by acid atmospheric deposition on the Veluwe, The Netherlands. Dutch Priority Programme on Acidification, Report 03-01.

- constituents: SO_2 , alkali and earth alkali cations and chloride. In: B. Ulrich and J. Pankrath (Eds.). Effects of accumulation of air pollutants in forest ecosystems. Dordrecht, The Netherlands. D. Reidel Publ. Co.: 33-45.
- Vries, W. de and A. Breeuwsma, 1986. Relative importance of natural and anthropogenic proton sources in soils in the Netherlands. Water, Air and Soil Pollut. 28: 173-184.
- Vries, W. de and A. Breeuwsma, 1987. The relation between soil acidification and element cycling. Water, Air and Soil Pollut. 35: 293-310.
- Vries, W. de, M.J.P.H. Waltmans, R. van Versendaal en J.J.M. van Grinsven, 1988. Aanpak, structuur en voorlopige procesbeschrijving van een bodemverzuringmodel voor toepassing op regionale schaal. Wageningen, STIBOKA, Rapport 2014.
- Vries, W. de en J. Kros, 1989. De lange-termijn effecten van verschillende depositiescenario's op representatieve bosbodems in Nederland. Wageningen, Staring Centrum, Rapport 30.